



**Titre:** Validation de schémas de calcul APOLLO3 pour assemblages de type RNR  
Title:

**Auteur:** Simon Berche  
Author:

**Date:** 2015

**Type:** Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis

**Référence:** Berche, S. (2015). Validation de schémas de calcul APOLLO3 pour assemblages de type RNR [Master's thesis, École Polytechnique de Montréal]. PolyPublie.  
Citation: <https://publications.polymtl.ca/1761/>

 **Document en libre accès dans PolyPublie**  
Open Access document in PolyPublie

**URL de PolyPublie:** <https://publications.polymtl.ca/1761/>  
PolyPublie URL:

**Directeurs de recherche:** Alain Hébert, & Jean-François Vidal  
Advisors:

**Programme:** Génie mécanique  
Program:

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

VALIDATION DE SCHÉMAS DE CALCUL APOLLO3 POUR ASSEMBLAGES DE  
TYPE RNR

SIMON BERCHE  
DÉPARTEMENT DE GÉNIE MÉCANIQUE  
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

MÉMOIRE PRÉSENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION  
DU DIPLÔME DE MAÎTRISE ÈS SCIENCES APPLIQUÉES  
(GÉNIE MÉCANIQUE)  
MAI 2015

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Ce mémoire intitulé :

VALIDATION DE SCHÉMAS DE CALCUL APOLLO3 POUR ASSEMBLAGES DE  
TYPE RNR

présenté par : BERCHE Simon

en vue de l'obtention du diplôme de : Maîtrise ès sciences appliquées

a été dûment accepté par le jury d'examen constitué de :

M. MARLEAU Guy, Ph. D., président

M. HÉBERT Alain, Doct., membre et directeur de recherche

M. VIDAL Jean-François, Doct., membre et codirecteur de recherche

M. CHAMBON Richard, Ph. D., membre

## DÉDICACE

*À ma famille et mes amis*

## REMERCIEMENTS

Tout d’abord, je souhaite remercier mon directeur de recherche Alain Hébert pour m’avoir accepté comme étudiant, aidé et financé pendant la maîtrise. Sans lui, je n’aurais pas eu la chance de faire un stage au CEA. Je le remercie également pour sa disponibilité et ses nombreux conseils.

Ensuite, j’aimerais remercier mon tuteur de stage et codirecteur de recherche Jean-François Vidal pour toute l’aide qu’il m’a apporté au cours du stage ainsi que pour sa disponibilité, son sens de l’écoute et sa patience. Je tiens également à remercier ses collègues du LEPH, notamment Pascal Archier, Jean-Marc Palau, Nans Odry, Yannick Pénéliou, Olivier Litaize et Vincent Pascal pour le support technique qu’ils m’ont fourni. De manière générale, j’aimerais remercier tout le LEPH et notamment le chef du laboratoire, Cyril de Saint Jean, pour l’opportunité offerte, l’excellent accueil, les conditions de travail optimales et l’ambiance chaleureuse. Je remercie par ailleurs les développeurs du code APOLLO3, en particulier Simone Santandrea, Fabien Auffret, Rémi Baron et Daniele Sciannandroni du SERMA à Saclay pour leur aide sur le code ainsi que pour leur grande réactivité par rapport à mes questions.

Je n’oublie pas de remercier les stagiaires et doctorants du LEPH ainsi que les étudiants du GA à l’INSTN pour leur accueil et leur camaraderie. Le séjour à Cadarache a été très agréable grâce à eux.

Je remercie également mon ami Kévin Herbreteau pour son aide et son soutien, notamment lors de notre collaboration à Polytechnique Montréal à l’été 2014. Je tiens aussi à remercier Nathan Greiner, mon ami et camarade de maîtrise, qui a effectué son stage chez EDF, pour toute l’aide qu’il m’a apportée.

Enfin, je souhaite remercier toute ma famille et mes amis pour leur soutien moral et financier depuis toujours. Dans les moments de doute et de stress, leur aide a été des plus précieuses.

## RÉSUMÉ

Les futures générations de réacteurs nucléaires sont déjà au stade de la construction pour certains et au stade de l'étude pour d'autres. Les réacteurs de 3ème et 4ème génération vont donc avoir besoin d'un code de calcul neutronique multifilières, c'est-à-dire un code "tout-terrain" permettant d'étudier différentes technologies de réacteur. Le code APOLLO3, développé au CEA Saclay, va donc hériter du patrimoine des codes APOLLO2 et ECCO/ERANOS pour assumer ce rôle de code multifilières. La validation est une étape essentielle au cours du développement d'un code de calcul de neutronique. Elle intervient après la phase d'implémentation et de vérification et permet à l'équipe de développement des schémas de calcul du CEA Cadarache d'avoir des retours sur le comportement du code de calcul dans diverses situations spécifiques.

Le but de ce mémoire est de proposer une validation à temps 0 du schéma de calcul réseau de référence des RNR basé sur le nouveau code APOLLO3, en étudiant des configurations très variées. Ce mémoire doit fournir un travail préparatoire à la validation qui sera effectuée à Cadarache en trouvant des pistes et des axes de travail.

La validation à temps 0 s'appuie sur l'utilisation de différentes configurations basées sur l'aiguille fissile, l'assemblage fissile. On effectue différents types d'étude : géométrie, effets de vidange, impact du maillage énergétique AEMC-RNR-1200, impact de l'évaluation JEFF3.2 pour le Pu239. La validation à temps 0 est basée ici sur l'étude des résultats macroscopiques ( $k_{eff}$ , écarts en réactivité, flux,...) et des résultats isotopiques (taux de fission et de capture pour le Pu239 et l'U238 par exemple). Cette validation prend comme référence le code Monte-Carlo TRIPOLI4. On précise que l'on travaille en réseau infini (absence de modèle de fuites,  $k_{eff} = k_{\infty}$ ).

La validation d'un motif cellule à temps 0 nous a amené à un certain nombre de conclusions. Tout d'abord, nous avons vu que la configuration géométrique de la cellule utilisée dans les études de prédéfinition (configuration standard) est suffisamment hétérogène. En effet, les milieux vides qu'elle comporte sont nécessaires afin de tester le comportement du solveur de flux dans le vide. Nous avons détecté un premier problème avec le maillage ECCO-1968 groupes : le traitement de la fission du Pu239 (écart important autour de 10 keV). Néanmoins, la nouvelle évaluation JEFF3.2 permet de régler ce problème en diminuant de manière importante les compensations sur le taux de fission du Pu239. Une autre possibilité mise en avant pour combler cet écart est d'utiliser un maillage plus adapté aux spectres spécifiquement

rapides du type AEMC-RNR-1200. Enfin, l'étude de configurations plus ou moins vidangées de la cellule a permis de confirmer le bon comportement du code APOLLO3 en situation de vidange. En effet, les écarts en réactivité en vidange (coefficient de vidange) calculés pour TRIPOLI4 et APOLLO3 sont cohérents et très proches.

En passant à l'étude de l'assemblage fissile, on cherche à retrouver les mêmes conclusions. Effectivement, le traitement de la fission du Pu239 reste problématique dans le cas de l'assemblage fissile : la fission du Pu239 y est même surestimée de façon plus importante. Nous nous sommes donc intéressés au boîtier d'acier qui est la seule structure qui apparaît avec le passage de la cellule à l'assemblage. En effet, la diffusion du Fe56 dans le boîtier EM10 est traitée avec un écart relatif conséquent entre APOLLO3 et TRIPOLI4. Nous avons creusé plusieurs pistes qui se sont avérées infructueuses. Malgré le remplacement de l'EM10 par du sodium, l'écart cumulé sur la fission du Pu239 est resté sensiblement le même.

Nous avons ensuite complété cela par une étude d'un cluster B4C : configuration de barres absorbantes environnées d'assemblages fissiles. Cette étude a montré la nécessité de tenir compte de l'anisotropie de la loi de choc à l'ordre 3 au moins, dans le but d'obtenir un écart sur l'absorption du B4C suffisamment faible. Pour terminer sur l'assemblage, nous avons décidé de nous intéresser à un cluster fissile / fertile : un assemblage fertile entouré d'assemblages fissiles. Notre axe de travail était principalement l'étude de la variation du flux le long d'une traverse (ici il s'agit d'un segment qui traverse le cluster en son centre). La variation du flux selon cette traverse et l'écart APOLLO3 - TRIPOLI4 correspondant sont faibles.

Enfin, nous avons également pu tester le solveur MOC-3D dans le cas d'une configuration cellule 3D. Cela nous a permis notamment d'observer la forte variation axiale du flux à l'interface fissile / fertile et de conclure sur la nécessité d'un maillage spatial très fin du fait de la représentation constante par tranche du flux MOC. À l'issue de cette étude, des développements polynomiaux sont envisagés pour le flux suivant  $z$ .

## ABSTRACT

The next generation nuclear reactors are already under construction or under development in the R&D labs around the world. The 3rd and 4th generation nuclear reactors will need a neutronic calculation code able to deal with any kind of technology (FBR or PWR for example). APOLLO3, a new neutronic code developed by the Commissariat à l’Energie Atomique, will receive the heritage of his two predecessors, APOLLO2 (PWR) and ECCO/ERANOS (FBR), and to play a major role in the design of the next nuclear reactors. Validation is an essential step along the development of a deterministic neutronic code. It comes right after implementation and verification and it gives the team in charge of the calculation models in Cadarache the necessary feedbacks on the code’s behaviour in various situations.

This thesis goal is to suggest a validation (without evolution) of the current APOLLO3 reference calculation route used for FBR. This validation is supposed to be as complete as possible and to cover various configurations. This work will be a preparatory work for the complete validation which will be performed by the APOLLO3 project team in Cadarache.

This validation is based on a study of various configurations composed of basic elements like pincells or assemblies. To complete this task, we study different aspects : geometry, sodium void effect, AEMC-RNR-1200 energy mesh, JEFF3.2 nuclear data evaluation for Pu239. We conduct a macroscopical study (multiplication factor, reactivity, neutron flux,...) and an isotopical study (fission and capture rates for Pu239 and U238 for example). We use TRIPOLI4, a Monte-Carlo simulation code, as a reference for all of our APOLLO3 calculations. We consider an infinite lattice (no neutron leakage model  $k_{eff} = k_{\infty}$ ).

This first validation phase led us to several conclusions. First of all, we observed that the geometrical configuration defined for the single pincell used in ASTRID predefinition studies is heterogeneous enough. Indeed, void media are really important to approve the behaviour of the APOLLO3 flux solver. The first issue we had was the treatment of the Pu239 fission rate with the ECCO-1968 energy mesh (important difference between APOLLO3 and TRIPOLI4 around 10 keV). Nonetheless, using the new evaluation of Pu239 fission in JEFF3.2 allowed to reduce significantly compensations concerning Pu239 fission rate. Another possibility to bridge this gap is use a new energetic mesh, more adapted to the fast spectra, AEMC-RNR-1200. Finally, the sodium void effect study conducted on more or less diluted configurations of the single pincell confirms the right behaviour adopted by APOLLO3 when the sodium void is significant. As a matter of fact, reactivity errors (void coefficient) are quite the same



for TRIPOLI4 and APOLLO3 for different values of Na23 dilution.

We tried to come to the same conclusions with the assemblies. Actually, Pu239 fission's treatment is still an issue in this case : the error on Pu239 fission rate is even larger than in the pincell case. That is why we decided to take a look at the fuel tube which is composed of steel and other isotopes. The fuel tube is the only structure differentiating the fuel rod (fuel pincell) from the fuel assembly. As a matter of fact, the diffusion by Fe56 in the fuel tube is calculated by APOLLO3 with an important relative error compared to TRIPOLI4. So we decided to go down different paths to investigate this error. Unfortunately, in spite of replacing EM10 (fuel tube) by Na23 (sodium), the cumulated error on Pu239 fission rate stayed roughly the same.

The next configuration is a neutron absorber assembly called the B4C cluster. It is composed of an ensemble of neutron absorber rods inserted in a steel tube surrounded by 6 fuel assemblies. This study showed us the necessity of using at least a P3 to approximate anisotropy of the scattering law, in order to reduce significantly the error on the B4C absorption rate. To finish the assembly study, we decided to take a look on a 2D fissile / fertile configuration called the fissile-fertile cluster. It is basically a fertile fuel assembly surrounded by 6 fissile fuel assemblies. Our main purpose was to focus on the neutronic flux variation along a "traverse" inside the cluster (it is a segment of fissile and fertile rods crossing the cluster in his geometric center). The variation of the flux for each energy group along this segment is not significant. The neutronic flux is maximal in fissile fuel rods and minimal in fertile rods considering the first groups of the energy mesh, but for energies  $< 100$  keV, the flux is flat, and it becomes minimal in fissile fuel rods and maximal in fertile rods.

Finally, we had the opportunity to test a 3D-MOC solver, which is a big technological leap for APOLLO3. We could observe the flux variation along an interface composed of several fissile and fertile fuel layers based on a pincell 2D configuration. It showed us the necessity of using a fine spatial mesh because the flux calculated by the MOC solver is supposed to be constant in each layer. For high energies ( $2$  MeV  $\rightarrow$   $100$  keV), the neutronic flux is at his highest level in the fissile layers, and at his lowest level in the fertile layers. For lower energies ( $< 40$  keV), the flux becomes flat (group 13) and then the flux variation is reversed. After this study, a polynomial development of the flux along the  $z$  axis has been considered.

## TABLE DES MATIÈRES

|  |       |
|--|-------|
| DÉDICACE . . . . .   | iii   |
| REMERCIEMENTS . . . . .  | iv    |
| RÉSUMÉ . . . . .   | v     |
| ABSTRACT . . . . .   | vii   |
| TABLE DES MATIÈRES . . . . .   | ix    |
| LISTE DES TABLEAUX . . . . .   | xiv   |
| LISTE DES FIGURES . . . . .  | xv    |
| LISTE DES ANNEXES . . . . .  | xvii  |
| LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS . . . . .   | xviii |
| CHAPITRE 1 INTRODUCTION . . . . .  | 1     |
| 1.1 Les RNR . . . . .  | 1     |
| 1.1.1 Forum International Génération IV . . . . .  | 1     |
| 1.1.2 Les RNR-Na . . . . .   | 1     |
| 1.1.3 Le projet ASTRID . . . . .   | 2     |
| 1.2 Le concept Coeur Faible Vidange d'ASTRID . . . . .   | 3     |
| 1.2.1 Présentation du concept . . . . .  | 3     |
| 1.2.2 Effet de vidange dans les RNR . . . . .  | 4     |
| 1.2.3 Originalité du concept CFV . . . . .   | 5     |
| 1.3 Contexte du stage, problématique . . . . .   | 6     |
| 1.3.1 Les codes de calcul dans le génie nucléaire . . . . .  | 6     |
| 1.3.2 Différences entre les codes stochastique et déterministe . . . . .                                     | 6     |
| 1.3.3 Concept de V&V . . . . .   | 7     |
| 1.3.4 Validation et mise en place des schémas de calcul APOLLO3 pour<br>assemblages de type ASTRID . . . . . | 8     |
| 1.4 Objectifs de recherche . . . . .   | 8     |
| 1.5 Plan du mémoire . . . . .  | 9     |

|            |   |    |
|------------|---|----|
| CHAPITRE 2 | Éléments de neutronique . . . . .   | 10 |
| 2.1        | Définitions de la neutronique . . . . .   | 10 |
| 2.1.1      | Concept de neutronique . . . . .  | 10 |
| 2.1.2      | Sections efficaces, taux de réaction . . . . .  | 10 |
| 2.2        | Équation de transport . . . . .   | 12 |
| 2.2.1      | Introduction . . . . .  | 12 |
| 2.2.2      | Grandeurs intervenant dans l'équation de transport . . . . .                              | 13 |
| 2.2.3      | Écriture de l'équation de transport . . . . .   | 13 |
| 2.2.4      | Facteur de multiplication effectif . . . . .  | 14 |
| 2.3        | Résolution numérique de l'équation de transport stationnaire . . . . .                    | 16 |
| 2.3.1      | Approche multigroupe . . . . .  | 16 |
| 2.3.2      | Équation de transport stationnaire multigroupe . . . . .                                  | 16 |
| 2.3.3      | Notion de domaine et de conditions aux frontières . . . . .                               | 17 |
| 2.4        | Quelques questions autour de l'équation de transport multigroupe . . . . .                | 18 |
| 2.4.1      | Forme caractéristique de l'équation de transport stationnaire multigroupe . . . . .       | 18 |
| 2.4.2      | Forme intégrale de l'équation de transport stationnaire multigroupe . . . . .             | 19 |
| 2.4.3      | Anisotropie de la diffusion . . . . .   | 19 |
| 2.5        | Autoprotection des résonances . . . . .   | 20 |
| 2.5.1      | Description du phénomène physique d'autoprotection . . . . .                              | 20 |
| 2.5.2      | Calcul des sections efficaces multigroupes autoprotégées . . . . .                        | 20 |
| 2.5.3      | Tables de probabilité . . . . .   | 21 |
| 2.5.4      | Méthode des sous-groupes ECCO . . . . .   | 23 |
| 2.5.5      | Utilisation des tables de probabilité dans la méthode des sous-groupes . . . . .          | 23 |
| 2.5.6      | Méthode des probabilités de collision . . . . .   | 24 |
| 2.5.7      | Tracking $P_{ij}$ . . . . .   | 26 |
| 2.5.8      | Méthodes des sous-groupes avec probabilités de collision . . . . .                        | 26 |
| 2.5.9      | Avantages et inconvénients de cette méthode . . . . .                                     | 28 |
| 2.6        | Calcul du flux dans APOLLO3 : petit rappel sur le MOC . . . . .                           | 28 |
| 2.6.1      | Équation de transmission . . . . .  | 29 |
| 2.6.2      | Obtention du flux . . . . .   | 30 |
| 2.6.3      | Tracking et temps de calcul . . . . .   | 30 |
| 2.6.4      | Tracking TDT-MOC dans notre schéma de calcul APOLLO3 . . . . .                            | 30 |
| 2.6.5      | Comparaison $P_{ij}$ / MOC et influence sur le choix des paramètres de tracking . . . . . | 31 |
| 2.7        | Notion de schéma de calcul pour les codes déterministes . . . . .                         | 31 |
| 2.7.1      | Données nucléaires . . . . .  | 31 |

|            |   |    |
|------------|---|----|
| 2.7.2      | Calcul réseau, calcul coeur et schéma de calcul . . . . .               | 32 |
| 2.8        | Le code APOLLO3 . . . . .   | 33 |
| 2.8.1      | Objectifs . . . . .   | 33 |
| 2.8.2      | Fonctionnalités et nouveautés . . . . .                                 | 34 |
| 2.9        | Schéma de calcul APOLLO3 . . . . .                                      | 36 |
| 2.9.1      | Schéma de référence et schéma de projet . . . . .                       | 36 |
| 2.9.2      | Description fine du schéma de calcul APOLLO3 . . . . .                  | 36 |
| 2.10       | Calcul stochastique et méthode Monte Carlo . . . . .                    | 41 |
| 2.10.1     | Introduction à la méthode Monte Carlo . . . . .                         | 41 |
| 2.10.2     | Éléments de théorie des probabilités . . . . .                          | 41 |
| 2.10.3     | Simulation du comportement des neutrons . . . . .                       | 43 |
| 2.10.4     | Évaluation du k-effectif . . . . .                                      | 43 |
| 2.10.5     | Estimation des taux de réaction . . . . .                               | 44 |
| CHAPITRE 3 | Configuration cellule à burnup nul . . . . .                            | 46 |
| 3.1        | Impact de la configuration de la pastille . . . . .                     | 46 |
| 3.1.1      | Présentation des différentes configurations possibles . . . . .         | 46 |
| 3.1.2      | Comportement des codes de simulation selon la configuration géométrique | 47 |
| 3.1.3      | Zoom sur les taux de réaction TRIPOLI4 . . . . .                        | 48 |
| 3.2        | Étude complète de la géométrie standard . . . . .                       | 50 |
| 3.2.1      | Comparaison globale . . . . .   | 50 |
| 3.2.2      | Flux moyen et taux de réaction isotopiques . . . . .                    | 51 |
| 3.3        | Étude des effets de vidange . . . . .                                   | 54 |
| 3.3.1      | Effet de vidange . . . . .  | 54 |
| 3.3.2      | Comportement des codes APOLLO3 et TRIPOLI4 en vidange . . . .           | 54 |
| 3.3.3      | Traitement de la fission du Pu239 en vidange . . . . .                  | 56 |
| 3.4        | Comparaison 1968g ECCO / 1200g AEMC RNR . . . . .                       | 57 |
| 3.4.1      | Étude macroscopique . . . . .   | 57 |
| 3.4.2      | Étude du flux dans le combustible et des taux de réaction isotopiques   | 58 |
| 3.5        | Comparaison entre JEFF3.1.1 et JEFF3.2 pour le Pu239 . . . . .          | 61 |
| 3.5.1      | Travail effectué dans JEFF3.2 sur le Pu239 . . . . .                    | 61 |
| 3.5.2      | Étude macroscopique . . . . .   | 61 |
| 3.5.3      | Étude du flux dans le combustible et des taux de réaction isotopiques   | 62 |
| CHAPITRE 4 | Assemblages divers à burnup nul . . . . .                               | 65 |
| 4.1        | Premiers résultats de l'assemblage fissile . . . . .                    | 65 |
| 4.1.1      | Configuration géométrique de l'assemblage fissile . . . . .             | 65 |

|            |   |    |
|------------|---|----|
| 4.1.2      | Maillage de calcul et premiers résultats . . . . .                                      | 66 |
| 4.1.3      | Étude de la fission du Pu239 et de la capture de l'U238 . . . . .                       | 67 |
| 4.1.4      | Diffusion du Fe56 et flux dans le tube . . . . .  | 68 |
| 4.1.5      | Étude du flux dans le combustible . . . . .   | 70 |
| 4.2        | Assemblage fissile avec boîtier Fe56 . . . . .  | 71 |
| 4.2.1      | Évolution du taux de diffusion . . . . .  | 71 |
| 4.2.2      | Évolution du flux dans le tube . . . . .  | 72 |
| 4.3        | Assemblage fissile avec boîtier Na23 . . . . .  | 73 |
| 4.3.1      | Configuration étudiée et résultats préliminaires . . . . .                              | 73 |
| 4.3.2      | Diffusion du Na23 dans le tube et écarts cumulés sur la configuration<br>Na23 . . . . . | 74 |
| 4.4        | Cluster B4C - fissile . . . . .   | 76 |
| 4.4.1      | Présentation des maillages de calcul . . . . .  | 76 |
| 4.4.2      | Cohérence des résultats Assemblage fissile - Cluster B4C . . . . .                      | 78 |
| 4.4.3      | Absorption du B4C . . . . .   | 79 |
| 4.4.4      | Fission Pu239 . . . . .   | 80 |
| 4.4.5      | Capture U238 . . . . .  | 81 |
| 4.5        | Cluster Fertile - Fissile . . . . .   | 82 |
| 4.5.1      | Présentation de l'étude du cluster fertile . . . . .                                    | 82 |
| 4.5.2      | Maillage de calcul 1/12 . . . . .   | 82 |
| 4.5.3      | Étude du flux moyen dans la traverse . . . . .  | 84 |
| 4.5.4      | Taux de fission Pu239 . . . . .   | 86 |
| 4.5.5      | Taux de capture U238 . . . . .  | 87 |
| 4.5.6      | Taux de fission U235 . . . . .  | 89 |
| CHAPITRE 5 | Validation du calcul MOC 3D . . . . .   | 90 |
| 5.1        | Présentation de l'étude de la configuration cellule 3D . . . . .                        | 90 |
| 5.1.1      | Contexte . . . . .  | 90 |
| 5.1.2      | Présentation des maillages axiaux utilisés . . . . .                                    | 91 |
| 5.2        | Représentation de la variation axiale du flux dans la cellule 3D . . . . .              | 92 |
| 5.2.1      | Groupes 1-2 . . . . .   | 92 |
| 5.2.2      | Groupes 9-10 . . . . .  | 93 |
| 5.2.3      | Applatissement du flux : Groupes 11-12 . . . . .  | 94 |
| 5.2.4      | Basculement du flux : Groupes 13-14 . . . . .   | 95 |
| 5.2.5      | Augmentation significative de l'écart : Groupes 23-24 . . . . .                         | 96 |
| 5.3        | Étude des taux de réaction isotopiques . . . . .  | 97 |

|                                 |   |     |
|---------------------------------|---|-----|
| 5.3.1                           | Erreur liée au calcul TRIPOLI4 . . . . .                    | 97  |
| 5.3.2                           | Erreur sur le taux de fission et de capture Pu239 . . . . . | 97  |
| 5.3.3                           | Erreur sur le taux de capture U238 . . . . .                | 99  |
| CHAPITRE 6 CONCLUSION . . . . . |   | 101 |
| 6.1                             | Synthèse des travaux . . . . .                              | 101 |
| 6.2                             | Limitations du travail effectué . . . . .                   | 102 |
| 6.3                             | Perspectives et améliorations futures . . . . .             | 103 |
| 6.3.1                           | Schéma de calcul . . . . .                                  | 103 |
| 6.3.2                           | Diminution du temps de calcul . . . . .                     | 103 |
| 6.3.3                           | Outils de validation . . . . .                              | 103 |
| RÉFÉRENCES . . . . .            |   | 104 |
| ANNEXES . . . . .               |   | 107 |

## LISTE DES TABLEAUX

|              |   |     |
|--------------|---|-----|
| Tableau 3.1  | Comparaison des différentes configurations géométriques . . . . .   | 47  |
| Tableau 3.2  | Comparaison des $k_{eff}$ sur la géométrie standard . . . . .   | 50  |
| Tableau 3.3  | Résultats obtenus pour différentes dilutions . . . . .  | 54  |
| Tableau 3.4  | Écarts en réactivité APOLLO3 / TRIPOLI4 pour différentes dilutions  | 54  |
| Tableau 3.5  | Écarts en réactivité entre les cas vidangés et le cas non-vidangé calculés<br>pour chaque code . . . . .          | 55  |
| Tableau 3.6  | Comparaison des $k_{eff}$ pour les maillages énergétiques 1968g ECCO et<br>1200g AEMC RNR . . . . .               | 57  |
| Tableau 3.7  | Comparaison des $k_{eff}$ pour les deux évaluations JEFF3.1.1 et JEFF3.2  | 61  |
| Tableau 4.1  | Résultats préliminaires de l'assemblage fissile . . . . .   | 66  |
| Tableau 4.2  | Écarts cumulés sur le Pu239 et l'U238 . . . . .   | 67  |
| Tableau 4.3  | Écarts cumulés sur le Pu239 et l'U238 . . . . .   | 71  |
| Tableau 4.4  | Résultats préliminaires sur la configuration Na23 et comparaison avec<br>la configuration standard EM10 . . . . . | 74  |
| Tableau 4.5  | Écarts cumulés sur le Pu239 et l'U238 dans la configuration Na23 . .  | 75  |
| Tableau 4.6  | $k_{eff}$ - Cluster et Assemblage . . . . .   | 78  |
| Tableau 4.7  | Écarts en réactivité - Cluster et Assemblage . . . . .  | 78  |
| Tableau 4.8  | Bilan cumulé de l'absorption B4C . . . . .  | 79  |
| Tableau 4.9  | Bilan cumulé sur le Pu239 . . . . .   | 80  |
| Tableau 4.10 | Bilan cumulé sur l'U238 . . . . .   | 81  |
| Tableau 4.11 | Bilan cumulé de la fission du Pu239 . . . . .   | 86  |
| Tableau 4.12 | Bilan cumulé de la capture de l'U238 dans le fissile et le fertile . . . .  | 87  |
| Tableau 4.13 | Bilan cumulé de la capture de l'U238 dans le fissile et le fertile . . . .  | 88  |
| Tableau 5.1  | Variation du $k_{eff}$ TRIPOLI4 en fonction du maillage . . . . .   | 97  |
| Tableau 5.2  | Écart sur le taux de fission Pu239 . . . . .  | 97  |
| Tableau 5.3  | Écart lié au taux de capture U238 . . . . .   | 99  |
| Tableau A.1  | Maillage énergétique 33 groupes ECCO . . . . .  | 107 |

## LISTE DES FIGURES

|             |  |    |
|-------------|--|----|
| Figure 1.1  | Schéma axial du concept CFV-V1 . . . . .   | 4  |
| Figure 2.1  | Phénomène d'autoprotection sur la résonance de l'U238 à 20.9 eV . .  | 20 |
| Figure 2.2  | Représentation d'une section efficace et de ses résonances sous forme<br>d'une table de probabilités . . . . . | 22 |
| Figure 2.3  | Schématisation d'une trajectoire cyclique dans une géométrie quelconque  | 27 |
| Figure 2.4  | Discrétisation en espace et en angle dans le MOC . . . . .   | 29 |
| Figure 2.5  | Schéma de calcul APOLLO3 . . . . .   | 36 |
| Figure 2.6  | Boucle interne de la méthode des sous-groupes pour un groupe g quel-<br>conque . . . . .                       | 38 |
| Figure 2.7  | Calcul à un groupe . . . . .   | 39 |
| Figure 2.8  | Calcul multigroupe . . . . .   | 40 |
| Figure 3.1  | Illustration des 3 configurations géométriques . . . . .   | 46 |
| Figure 3.2  | Taux de réaction - Pu239 . . . . .   | 48 |
| Figure 3.3  | Taux de réaction - U238 . . . . .  | 49 |
| Figure 3.4  | Flux moyen dans le combustible . . . . .   | 51 |
| Figure 3.5  | Taux de fission et de capture de l'U238 . . . . .  | 52 |
| Figure 3.6  | Taux de fission et de capture du Pu239 . . . . .   | 53 |
| Figure 3.7  | Évolution du taux de fission du Pu239 en vidange . . . . .   | 56 |
| Figure 3.8  | Flux moyen dans le combustible . . . . .   | 58 |
| Figure 3.9  | Taux de fission et de capture du Pu239 . . . . .   | 59 |
| Figure 3.10 | Taux de fission et de capture de l'U238 . . . . .  | 60 |
| Figure 3.11 | Flux moyen dans le combustible . . . . .   | 62 |
| Figure 3.12 | Taux de fission et de capture du Pu239 . . . . .   | 63 |
| Figure 3.13 | Taux de fission et de capture de l'U238 . . . . .  | 64 |
| Figure 4.1  | Passage de la cellule à l'assemblage . . . . .   | 65 |
| Figure 4.2  | Maillage de calcul et zonage correspondant . . . . .   | 66 |
| Figure 4.3  | Fission du Pu239 et capture de l'U238 dans la zone 2 . . . . .   | 67 |
| Figure 4.4  | Diffusion élastique et inélastique du Fe56 dans le tube . . . . .  | 68 |
| Figure 4.5  | Flux moyen dans le tube . . . . .  | 69 |
| Figure 4.6  | Flux moyen dans la zone 2 . . . . .  | 70 |
| Figure 4.7  | Diffusion élastique et inélastique du Fe56 dans le boîtier . . . . .   | 71 |
| Figure 4.8  | Flux moyen dans le tube . . . . .  | 72 |
| Figure 4.9  | Flux moyen dans le tube . . . . .  | 73 |



|             |   |     |
|-------------|---|-----|
| Figure 4.10 | Diffusion élastique et inélastique du Na23 dans le boîtier . . . . .                                | 74  |
| Figure 4.11 | Maillages de calcul APOLLO3 et TRIPOLI4 pour la configuration cluster B4C . . . . .                 | 76  |
| Figure 4.12 | Représentation 1/12 du réseau hexagonal B4C . . . . .   | 77  |
| Figure 4.13 | Taux d'absorption dans le B4C-C1 . . . . .  | 79  |
| Figure 4.14 | Taux de fission du Pu239 dans les zones 1 et 2 . . . . .  | 80  |
| Figure 4.15 | Taux de capture de l'U238 dans les zones 1 et 2 . . . . .   | 81  |
| Figure 4.16 | Représentation partielle d'un cluster fertile - fissile . . . . .                                   | 82  |
| Figure 4.17 | Maillage de calcul 1/12 du cluster fertile . . . . .  | 83  |
| Figure 4.18 | Traverse . . . . .  | 83  |
| Figure 4.19 | Variation du flux moyen dans la traverse - Groupes 9 et 10 . . . . .                                | 84  |
| Figure 4.20 | Variation du flux moyen dans la traverse - Groupes 11 et 12 . . . . .                               | 85  |
| Figure 4.21 | Taux de fission Pu239 . . . . .   | 86  |
| Figure 4.22 | Taux de capture U238 dans le fissile . . . . .  | 87  |
| Figure 4.23 | Taux de capture U238 dans le fertile . . . . .  | 88  |
| Figure 4.24 | Taux de fission U235 dans le fertile . . . . .  | 89  |
| Figure 5.1  | Représentation à l'échelle 1/2 des différents maillages . . . . .                                   | 91  |
| Figure 5.2  | Variation axiale du flux moyen dans les groupes 1 et 2 . . . . .                                    | 92  |
| Figure 5.3  | Variation axiale du flux moyen dans les groupes 9 et 10 . . . . .                                   | 93  |
| Figure 5.4  | Variation axiale du flux moyen dans les groupes 11 et 12 . . . . .                                  | 94  |
| Figure 5.5  | Variation axiale du flux moyen dans les groupes 13 et 14 . . . . .                                  | 95  |
| Figure 5.6  | Variation axiale du flux moyen dans les groupes 23 et 24 . . . . .                                  | 96  |
| Figure 5.7  | Représentation du taux de fission et de capture du Pu239 dans le combustible fissile . . . . .      | 98  |
| Figure 5.8  | Représentation du taux de capture U238 dans le combustible fissile et le matériau fertile . . . . . | 99  |
| Figure B.1  | Absorption du Fe56 dans le tube . . . . .   | 108 |
| Figure C.1  | Capture du Pu239 dans le cluster B4C . . . . .  | 109 |
| Figure C.2  | Fission de l'U238 dans le cluster B4C . . . . .   | 110 |
| Figure D.1  | Capture du Pu239 dans le cluster fertile . . . . .  | 111 |
| Figure D.2  | Variation du flux dans la traverse - Groupes 1 et 2 . . . . .                                       | 112 |
| Figure D.3  | Variation du flux dans la traverse - Groupes 23 et 24 . . . . .                                     | 113 |
| Figure E.1  | Fission de l'U238 dans la cellule 3D . . . . .  | 114 |

**LISTE DES ANNEXES**

|   |     |
|---|-----|
| ANNEXE A : Maillage énergétique . . . . .       | 107 |
| ANNEXE B : Assemblage fissile . . . . .         | 108 |
| ANNEXE C : Cluster B4C . . . . .                | 109 |
| ANNEXE D : Cluster fertile-fissile . . . . .    | 111 |
| ANNEXE E : Cellule 3D fissile-fertile . . . . . | 114 |

## LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS

|        |  |
|--------|--|
| RNR    | Réacteur à Neutrons Rapides  |
| ASTRID | Advanced Sodium Technological Reactor for Industrial Demonstration |
| CEA    | Commissariat à l'Energie Atomique et aux énergies alternatives     |
| TGCC   | Très Grand Centre de Calcul  |
| CCRT   | Centre de Calcul Recherche et Technologie                          |
| REP    | Réacteur à Eau Pressurisée   |
| LEPh   | Laboratoire d'Etudes Physiques                                     |
| LTSD   | Laboratoire de Transport Stochastique et Déterministe              |
| SERMA  | Service d'Etudes des Réacteurs et de Mathématiques Appliquées      |
| SPRC   | Service de Physique des Réacteurs et du Cycle                      |
| CFV    | Coeur à Faible Vidange   |

## CHAPITRE 1 INTRODUCTION

### 1.1 Les RNR

#### 1.1.1 Forum International Génération IV

En raison de l'augmentation de la population mondiale ainsi que du développement rapide des nouvelles puissances économiques mondiales telles que la Chine, les besoins énergétiques vont croître de façon importante au cours du XXIème siècle. En parallèle, les ressources fossiles (pétrole, charbon, etc..) vont être de plus en plus chères à cause de leur extraction toujours plus complexe. Leur exploitation industrielle à des fins de production d'énergie électrique ou mécanique va occasionner des émissions de gaz à effet de serre, dont le CO<sub>2</sub>, toujours plus importantes. C'est pourquoi, dans une optique de lutte contre le réchauffement climatique, certains pays se tournent vers la production électrique "non carbonée", comme l'énergie nucléaire.

L'énergie nucléaire est donc un enjeu scientifique de ce siècle et des siècles à venir. La question qui se pose alors est la suivante : le nucléaire peut-il satisfaire sur le long terme cette demande croissante en énergie. Cette question est légitime dans le sens où les ressources en uranium ne sont pas illimitées et que l'utilisation d'autres combustibles n'est pas non plus une solution pérenne. C'est là qu'intervient la recherche sur les réacteurs nucléaires de prochaine génération. La conception de ces réacteurs devra s'inscrire dans une perspective de développement durable et de préservation maximale des ressources disponibles sur notre planète.

Les enjeux auxquels devront répondre ces réacteurs seront multiples : exploiter la totalité du minerai d'uranium, recycler au maximum le combustible utilisé issu des réacteurs actuels et diminuer la radiotoxicité des déchets, ceci tout en assurant un fonctionnement répondant aux critères de sécurité les plus exigeants. Afin d'accélérer les efforts de recherche sur les différents projets étudiés, un forum international a été créé, le forum Génération IV, dans le but de mettre en commun les différentes ressources de R & D.

#### 1.1.2 Les RNR-Na

Une des technologies retenues par le GIF (Generation IV International Forum) est la technologie des Réacteurs à Neutrons Rapides refroidis au sodium (appelés RNR-Na ou SFR en anglais pour Sodium-cooled Fast Reactor). Le RNR-Na est un système à neutrons rapides capable de régénérer son combustible et de le recycler en grande partie. Le sodium liquide est utilisé comme caloporteur car il présente une masse atomique supérieure à celle de l'eau, il capture et ralentit moins les neutrons. Contrairement à l'eau, le sodium n'a pas besoin d'être

sous pression parce que sa température d'ébullition est très supérieure à la température de fonctionnement du réacteur.

### **Surgénération et recyclage**

Le principe de régénération consiste à produire un noyau fissile à partir d'un noyau fertile par capture d'un neutron. La régénération permet par exemple de remplacer chaque noyau de Pu239 brûlé par un nouveau noyau issu de la capture d'un neutron par un noyau de U238. Le principal problème vient de l'apport en neutrons qui doit être suffisant. Par ailleurs, en spectre thermique, les sections efficaces de capture sont très grandes pour les isotopes fissiles, on risque alors de perdre principalement ces neutrons sur des isotopes fissiles. On choisit alors d'utiliser le spectre rapide : c'est à dire des neutrons à plus haute énergie (moins ralentis, d'où l'intérêt d'utiliser un matériau peu ralentisseur comme le sodium). Actuellement, l'objectif est de brûler de l'U238 (actinide majeur fertile) et de transmuter l'américium (actinide mineur).

### **Utilisation industrielle du concept de surgénération dans un RNR**

L'intérêt de l'utilisation de la surgénération est de brûler entièrement l'U238 et donc réduire l'importance du raffinage en U235. En effet, un spectre rapide permet de valoriser tout le cycle de l'U238, en particulier les actinides produits par capture neutronique tels que le Pu239. Ces éléments sont considérés comme des déchets, sauf pour la filière MOX où ils sont réutilisés une seule fois dans un combustible qui mélange plusieurs oxydes. La production d'actinides par les RNR serait donc positive et permettrait au réacteur d'atteindre un état autosuffisant en combustible à partir d'un chargement en combustible fissile/fertile.

#### **1.1.3 Le projet ASTRID**

##### **L'avenir des RNR**

L'emprunt national français de 2010 a permis au gouvernement d'allouer 1 milliard d'euros aux programmes de recherche du nucléaire civil. De cette somme, 650 millions sont destinés au programme ASTRID (Advanced Sodium Technological Reactor for Industrial Demonstration) qui est un prototype dont le but est de lancer le programme de déploiement industriel de la technologie RNR-Na à l'horizon 2040.

La conception d'ASTRID ne part pas de zéro mais s'appuie sur le retour d'expérience des projets PHENIX et SUPERPHENIX dans une filière qui a été beaucoup étudiée par la France dès les années 50. Le projet est mené par le CEA mais repose également sur d'autres partenaires français (EDF, AREVA, etc..) et internationaux (Japon). ASTRID est un réacteur d'une puissance de 600 MWe.

## Les attentes autour d'ASTRID

ASTRID devra tester certaines innovations en matière de sûreté et d'opérabilité tout en visant une disponibilité de 80%. Il devra également démontrer la faisabilité d'une transmutation des actinides mineurs (AM) sur des quantités significatives. En terme de sûreté, les aspects suivants seront pris en compte :

1. Fusion du coeur : conception d'un coeur optimisé permettant d'éviter une augmentation de la réactivité en cas d'ébullition local du sodium (étude des effets de vidange)
2. Ajouts de dispositifs supplémentaires permettant d'atteindre un état sûr du réacteur même en cas de problème d'abaissement des barres de contrôle.
3. Elimination des possibilités d'interaction entre le sodium, l'air et l'eau : générateur double paroi, remplacement circuit vapeur / circuit gaz, réalisation d'un circuit intermédiaire utilisant un fluide réagissant peu avec l'eau et le sodium.

## Feuille de route du projet ASTRID

Une déclaration du Président de la République Française J. Chirac de janvier 2006 est l'acte de naissance d'ASTRID : "De nombreux pays travaillant sur la nouvelle génération de réacteurs, celle des années 2030-2040, qui produira moins de déchets et exploitera mieux les matières fissiles. J'ai décidé de lancer, dès maintenant, la conception, au sein du CEA, d'un prototype de 4ème génération, qui devra entrer en service en 2020. Nous y associerons, naturellement, les partenaires industriels ou internationaux qui voudraient s'engager".

Le projet d'un prototype mis en service avant la fin des années 2020 est mentionné dans la loi du 28 juin 2006 relative à la gestion durable des matières et déchets radioactifs, ainsi que dans la convention du 09/09/2010 entre l'Etat et le CEA relative aux programmes d'investissement d'avenir, programmes qui intègrent ASTRID et valident le choix de la technologie RNR-Na. Suite à la phase d'avant projet AVP1, un dossier de sûreté a été transmis à l'ASN en juin 2012. Selon le calendrier actuel, l'avant-projet sommaire sera prêt fin 2015 et un avant projet détaillé est prévu fin 2019 pour une mise en service fin 2026. Il faut rappeler que la décision de construction n'a bien sûr pas encore été prise.

## 1.2 Le concept Coeur Faible Vidange d'ASTRID

### 1.2.1 Présentation du concept

Dans cette section, on s'attache à décrire le concept de coeur développé pour le réacteur ASTRID. Ce coeur est appelé CFV (Coeur à Faible Vidange). L'objectif de ce coeur hétérogène est d'innover sur les points suivants :

- Optimisation des contre-réactions neutroniques (effet Doppler, effet de variation géométrique de dilatation ou compaction du coeur)
- Effet en réactivité global  $< 0$  en situation de vidange
- Faible chute de réactivité durant le cycle

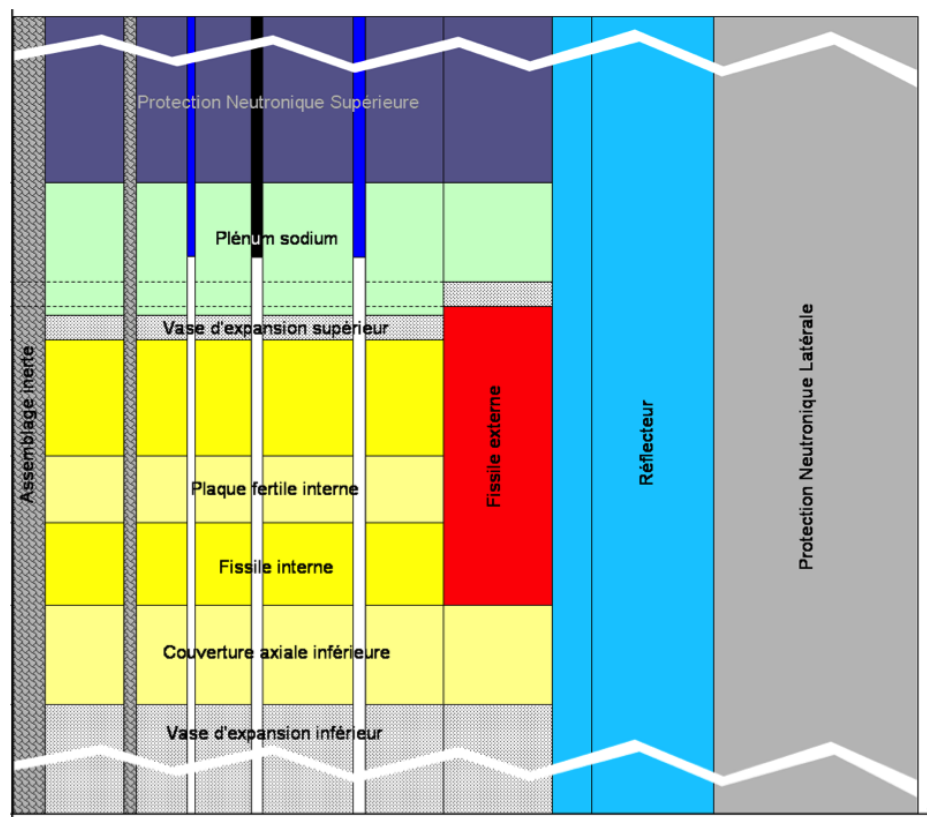


Figure 1.1 Schéma axial du concept CFV-V1

### 1.2.2 Effet de vidange dans les RNR

L'effet de vidange est l'effet en réactivité lié à la vaporisation du caloporteur sodium dans le coeur (Varaine (2014)). Cet effet est la résultante de plusieurs composantes qui s'annulent. Il faut commencer par observer que le sodium est légèrement capturant et qu'il contribue au ralentissement des neutrons par diffusion élastique et inélastique.

La vidange du sodium va donc provoquer directement une augmentation de réactivité par diminution de la capture mais également provoquer un durcissement du spectre par réduction du ralentissement (diffusion). Indirectement, le durcissement du spectre a des conséquences importantes sur la réactivité, en raison de son impact sur l'absorption et la production des isotopes du combustible. La diminution du ralentissement va également augmenter les fuites

de neutrons vers les zones périphériques du coeur, ce qui va contribuer à une baisse de réactivité dans ce dernier.

Cette vidange va modifier l'autoprotection des sections efficaces des isotopes lourds en raison de la variation du taux de dilution. Néanmoins, l'amplitude de ce phénomène est négligeable devant la composante spectrale. L'effet en réactivité de la vidange du sodium dans un RNR est donc la résultante de deux composantes opposées : composante spectrale et composante de fuites.

L'effet de vidange est positif au centre du coeur et négatif en périphérie (prépondérance successive de chaque composante). Ainsi, plus le coeur est gros, plus le coefficient de vidange global est important, ce qui est un problème de sûreté. En effet, une vaporisation localisée, par augmentation locale de la puissance, pourrait se propager dans le coeur. Pour conserver une sûreté optimale, on cherche à concevoir un coeur avec le plus faible coefficient de vidange possible. Pour y arriver, il y a plusieurs possibilités :

- Modification de la géométrie du coeur pour minimiser le volume de Na23
- Aplatissement du coeur ou disposition de plénums sodium en partie haute afin d'augmenter les fuites de neutrons
- Mélange de zones fertiles et fissiles dans le coeur

### 1.2.3 Originalité du concept CFV

Pour répondre aux attentes de sûreté qui existent autour du nouveau réacteur ASTRID, les chercheurs du CEA ont mis au point le Coeur Faible Vidange, concept permettant de réduire l'effet de vidange sodium de manière à ce qu'il soit nul, voir négatif, et ceci pour un large éventail de puissance (Varaine (2014)).

Ce concept amplifie la composante de fuite en la ramenant au niveau de la composante spectrale, en utilisant des dispositions géométriques innovantes (voir figure 1.1 ) :

- Combustibles, plaques fertiles et couverture fertile disposés en creuset
- Plénum sodium et absorbant en partie supérieure
- Hauteur centrale de coeur réduite

Le plénum sodium est un réflecteur de neutrons en fonctionnement normal mais devient un canal à neutrons en cas de vidange (ébullition). L'hétérogénéité axiale (assortiment de tranches fertiles et fissiles) et l'asymétrie radiale (utilisation de couches interne/externe) ont pour but de favoriser les fuites neutroniques. La superposition de milieux très différents



(fissile/fertile) va créer des gradients de flux importants. Il s'agit d'une situation intéressante à traiter avec un code de calcul dans l'optique de vérifier son bon comportement.

### **1.3 Contexte du stage, problématique**

#### **1.3.1 Les codes de calcul dans le génie nucléaire**

Quel que soit le domaine du génie nucléaire dans lequel on travaille (conception coeur, sûreté, pilotage, etc..), on fait appel à des codes de calcul afin de modéliser le comportement des neutrons dans le réacteur. L'étude des neutrons est basée sur la résolution de l'équation de Boltzmann, qui modélise la population neutronique et son évolution spatio-temporelle. La connaissance du flux neutronique dans le réacteur est vitale afin de modéliser le comportement de ce dernier et de calculer la puissance thermique qu'il dégage.

Malheureusement, cette équation n'est pas solvable analytiquement, il faut donc faire appel à des méthodes numériques afin de la résoudre, tout en cherchant à diminuer l'erreur avec laquelle cette équation est résolue.

Deux familles de codes de calcul permettent de résoudre les problèmes de neutroniques :

1. les codes déterministes : basés sur une discrétisation de l'équation de Boltzmann
2. les codes stochastiques : basés sur une approche statistique et le concept de marche aléatoire

#### **1.3.2 Différences entre les codes stochastique et déterministe**

Les codes déterministes sont basés sur une résolution approchée de l'équation de Boltzmann. Par ailleurs, la résolution neutronique entière d'un coeur est effectuée en plusieurs étapes :

1. Réseau : un calcul réseau (géométrie de base comme un assemblage fissile par exemple) qui produit un certain nombre de paramètres représentatifs gardés en mémoire pour la suite du calcul déterministe (sections efficaces, concentrations isotopiques, etc..)
2. Coeur : un calcul coeur qui utilise des méthodes de résolution différentes appliquée à toute la géométrie coeur (géométrie bien plus grande que celle d'une géométrie réseau), un maillage énergétique très grossier, et qui utilise les données condensées et homogénéisées issues du calcul réseau (en particulier les sections autoprotégées)

Cette logique à 2 niveaux a été mise en place afin de palier au manque de capacités de calcul des ordinateurs. Néanmoins, l'accroissement de la puissance de calcul des ordinateurs a permis l'apparition de nouvelles méthodes telles que la méthode des caractéristiques (MOC, présentée succinctement dans le chapitre 2 du mémoire).

Parallèlement à ces codes, ont été développés les codes stochastiques (les méthodes de Monte Carlo par exemple, reposant sur la loi des grands nombres). Ces codes permettent d'étudier la neutronique d'une géométrie quelconque (coeur, réseau) en simulant le comportement aléatoire d'un grand nombre de neutrons. On considère que ces calculs basés sur des grands nombres de neutron fournissent des mesures étalon. L'utilisation de ces codes stochastiques très gourmands en ressources prend alors tout son sens avec l'apparition des supercalculateurs tels que **Airain** et **Curie** (des centres de calcul **CCRT - TGCC**).

### 1.3.3 Concept de V&V

Nous allons expliquer ici la démarche de vérification et validation mise en place pour le nouveau code du CEA APOLLO3®. La V & V (Vérification et Validation) est une appellation qui vise à englober tout le travail post-développement et pré-qualification.

**Vérification** : cela consiste à s'assurer que les résultats produits par les fonctionnalités de base (solveurs, modèles, etc...) ainsi que l'ordre d'utilisation de ces fonctionnalités sont conformes à ce qui est attendu. On cherche à établir la conformité informatique et algorithmique du code ainsi que les flots de données qu'il produit.

**Validation** : cela consiste à s'assurer que le code (ou une partie du code) a la capacité de représenter correctement un certain nombre de phénomènes physiques : pour cela on compare les résultats à une référence mesurée ou calculée dans un domaine d'application particulier. La validation peut se faire en plusieurs étapes : étude des phénomènes physiques élémentaires puis étude combinée de ces phénomènes. Il faut savoir qu'un dossier de validation se construit sur une comparaison (à mêmes données nucléaires imposées bien-sûr) des résultats produits par le code déterministe avec ceux produits par un code stochastique Monte Carlo comme TRIPOLI4, ceux issus de codes déterministes plus anciens déjà éprouvés sur un domaine d'application similaire (benchmarking) ou ceux produits lors d'une expérience (on touche ici à ce qu'on appelle la qualification).

Pour constituer le dossier de V & V du code APOLLO3, l'équipe du CEA a décidé de retenir l'approche PIRT (Phenomena Identification and Ranking Table). Cela consiste à recenser et hiérarchiser les phénomènes physiques les plus importants qui seront modélisés par le code. Pour mettre en place la V & V, on traite différents types de données :

1. Paramètres d'intérêt : réactivité, puissance, inventaire, ...

2. Fonctionnalités : autoprotection, flux, maillage, évolution, ...
3. Cas-tests : benchmarks numériques, maquettes critiques, benchmarks internationaux, réacteurs expérimentaux

Mon travail en tant que stagiaire au CEA s'insère au tout début des travaux de validation effectués sur le code APOLLO3 et s'inspire grossièrement de l'approche PIRT. En effet, il faut rappeler que le code est encore en phase de développement et que les outils de validation développés dans le cadre de la V & V le sont également.

### 1.3.4 Validation et mise en place des schémas de calcul APOLLO3 pour assemblages de type ASTRID

Dans le cadre de la maîtrise, un stage de recherche a été effectué au au sein du *Laboratoire d'Etudes Physiques* dépendant du *Service de Physique des Réacteurs et du Cycle* (DEN/DER/SPRC/LEPh - CEA Cadarache). Au sein de l'équipe spécialisée en neutronique du laboratoire, mon rôle était de participer à la mise en place et la validation des schémas de calcul utilisés pour les calculs d'assemblages pour un réacteur de type ASTRID. En effet, les éléments techniques (géométrie, composition des matériaux, etc...) sont issus des notes techniques produites par l'équipe projet responsable de la conception du coeur ASTRID et nous ont servi à fabriquer les cas-tests utilisés lors de la validation.

**APOLLO3<sup>®</sup>** est un code déterministe développé par le *Laboratoire de Transport Stochastique et Déterministe* au sein du *Service d'Etudes des Réacteurs et de Mathématiques Appliquées* (DEN/DER/DM2S/SERMA/LTSD - CEA Saclay). L'objectif du code est de proposer un outil de calcul multifilières ( REP ou RNR ) adapté à l'étude d'une multitude de coeurs différents en capitalisant l'expérience REP du code **APOLLO2<sup>®</sup>** ainsi que l'expérience RNR du code **ECCO/ERANOS<sup>®</sup>**.

Pour valider les schémas de calcul **APOLLO3<sup>®</sup>**, il a été décidé d'utiliser le code stochastique **TRIPOLI4<sup>®</sup>** (version 4.9), lui aussi développé au LTSD. **APOLLO3<sup>®</sup>** est encore en pleine phase de développement, à savoir que des modules sont ajoutés ou modifiés au fur et à mesure et testés. L'étape de vérification est donc toujours nécessaire afin de donner aux développeurs du code un retour sur les développements versés au code. L'interaction avec les autres acteurs du projet est donc une problématique essentielle de ce travail.

## 1.4 Objectifs de recherche

On cherche à comparer les grandeurs neutroniques (taux de réaction,  $k_{eff}$ , flux, etc..) produites par les calculs APOLLO3 et TRIPOLI4 pour des géométries réseau de type RNR

(ASTRID) plus ou moins complexes (aiguille simple, assemblage fissile, cluster barre absorbante / fissile, environnement fissile/fertile 3D, cluster fissile / fertile). Ceci est fait afin de pouvoir conclure sur la capacité du code déterministe APOLLO3 à fournir des paramètres réseau (sections efficaces, concentrations isotopiques) les moins biaisés au solveur chargé de la résolution numérique du coeur entier.

Au cours de notre étude, on devra également être attentif aux données nucléaires (provenant des évaluations post traitées) car celles-ci viennent en amont de notre calcul réseau. On cherche également à obtenir les paramètres de solveur numérique permettant une optimisation du ratio précision / temps de calcul. Le neutronicien doit donc faire face à une double problématique : les données nucléaires en amont qu'il ne maîtrise pas forcément et les ressources de calcul (mémoire, nombre de coeurs, temps d'accès aux centres de calcul, etc..) dont il dispose.

## 1.5 Plan du mémoire

Dans le chapitre 2, nous allons détailler le schéma de calcul actuel utilisé avec APOLLO3 pour les calculs RNR. Ensuite, nous attaquerons la validation par une étude détaillée du motif élémentaire du réseau, la cellule, dans le chapitre 3 . Puis nous passerons dans le chapitre 4 à l'étude de l'assemblage fissile standard utilisé dans le projet ASTRID, ainsi que plusieurs autres configurations plus complexes basées sur cet assemblage. Enfin, dans le chapitre 5, nous terminerons notre travail en présentant les résultats préliminaires produits par le solveur MOC-3D, outil nouvellement implémenté dans le code APOLLO3.

## CHAPITRE 2 Éléments de neutronique

### 2.1 Définitions de la neutronique

#### 2.1.1 Concept de neutronique

Le neutronicien, en tant que physicien des réacteurs, cherche à prédire le comportement des neutrons dans un réacteur nucléaire et cela passe par la connaissance de la distribution de la population neutronique dans l'espace et le temps. Il faut donc prendre en compte les interactions des neutrons avec la matière au sein du réacteur nucléaire. La complexité de ce problème vient du fait que les interactions neutroniques ont des caractéristiques qui varient avec la distribution en énergie du neutron. Premièrement, nous allons caractériser les interactions des neutrons avec la matière.

#### 2.1.2 Sections efficaces, taux de réaction

Dans la matière, les interactions ayant lieu entre les neutrons et les noyaux sont diverses. On utilise alors le concept de section efficace pour caractériser la probabilité qu'une réaction nucléaire d'un certain type se produise lorsqu'un neutron rencontre un noyau. On cherche alors à étudier les variations importantes de cette section efficace selon les niveaux d'énergie du neutron incident.

La section efficace microscopique s'exprime en *barns* ( $1\text{ b} = 10^{-24}\text{ cm}^2$ ) et on peut la relier au taux de réaction par l'équation suivante :

$$R_{x,i,D,\Delta E} = \int_D d^3r \int_{\Delta E} dE N_i \sigma_{x,i}(\mathbf{r}, E) \phi(\mathbf{r}, E) \quad (2.1)$$

- $D$  est le domaine spatial considéré
- $\Delta E$  est le domaine énergétique
- $\phi$  est le flux scalaire
- $\sigma_{x,i}$  est la section efficace microscopique pour la réaction  $x$  pour un isotope  $i$
- $N_i$  la concentration de l'isotope  $i$

En neutronique, on calcule souvent le taux de réaction intégré en volume afin d'obtenir une grandeur définie sur une région de calcul ainsi que des grandeurs intégrées en énergie.

Pour en revenir aux sections efficaces microscopiques d'un isotope donné, on en définit autant qu'il y a de réactions nucléaires possibles entre un neutron incident et un noyau de l'isotope concerné. Aux énergies concernant la physique des réacteurs, il existe deux types de réaction possible :

- **Diffusion potentielle élastique** : réflexion du neutron par la barrière de potentiel du noyau
- **Formation d'un noyau composé** : le neutron incident apporte son énergie de liaison et son énergie cinétique au noyau initial qui est alors excité

Le noyau composé peut se désexciter selon plusieurs voies :

- **Diffusion résonnante élastique** ( $n, n$ ) : le noyau revient à son état fondamental
- **Diffusion résonnante inélastique** ( $n, n'$ ) : le noyau ne revient pas à son état fondamental mais conserve son identité et se désexcite en émettant un photon
- **Capture radiative** ( $n, \gamma$ ) : le noyau composé se désexcite en émettant un ou plusieurs photons
- **Fission** ( $n, f$ ) : le noyau se désexcite en se fragmentant en 2 ou 3 fragments de fission avec émission de plusieurs neutrons et de photons
- Autres réactions (transmutations, réactions ( $n, xn$ ), etc...)

Par ailleurs, les autres interactions impliquant les neutrons sont négligeables. Les interactions neutrons-électrons le sont car elles ne peuvent se faire que par interaction faible. Les interactions neutrons-neutrons sont négligeables à cause du faible nombre de neutrons comparé au nombre de noyaux (1 pour  $10^{14}$ ). Nous allons maintenant nous intéresser à la modélisation du comportement des neutrons dans le réacteur nucléaire.

## 2.2 Équation de transport

### 2.2.1 Introduction

On peut considérer que la population neutronique dans un réacteur est assimilable à un gaz parfait. C'est dans cette optique que les neutroniciens ont adapté l'équation de Boltzmann écrite en 1879 pour obtenir l'*équation de transport*. Cette équation dresse le bilan de la population neutronique dépendant des variables suivantes : temps, vitesse (ou énergie et direction) et espace tout en prenant en compte les différentes réactions qui font apparaître, disparaître des neutrons ou changer leur énergie et leur direction.

On décrit ci dessous les variables usuelles de la neutronique ainsi que les données d'entrée de l'équation de Boltzmann pour le transport des neutrons. Les vecteurs sont écrits en gras afin d'alléger les notations.

- *Point*  $\mathbf{r}$  : Position du neutron dans le système en  $cm$
- *Vitesse*  $\mathbf{v}$  : Vitesse du neutron en  $cm.s^{-1}$
- *Phase*  $\mathbf{\Omega} = \frac{\mathbf{v}}{||\mathbf{v}||}$  : Direction du neutron en  $sr$
- *Temps*  $t$  : Instant considéré en  $s$
- *Énergie*  $E$  : Énergie du neutron en  $eV$  -  $keV$  -  $MeV$
- *Léthargie*  $u = \ln(\frac{E}{E_0})$  : Écart entre l'énergie  $E$  et une énergie de référence  $E_0$
- *Concentration*  $N_i(\mathbf{r}, t)$  : Nombre d'atomes de l'isotope  $i$  par unité de volume en  $cm^{-3}$
- *Section efficace microscopique*  $\sigma_i(E)$  : Exprimée en  $b$  ( *barn* )
- *Section efficace macroscopique*  $\Sigma(\mathbf{r}, E, t) = \sum_{i=1} N_i(\mathbf{r}, t)\sigma_i(E)$  : Section efficace calculée pour tous les noyaux d'un même milieu en  $cm^{-1}$
- *Libre parcours moyen*  $\frac{1}{\Sigma(\mathbf{r}, E, t)}$  : Distance moyenne parcourue entre deux collisions en  $cm$
- *Multipliation par fission*  $\nu$  : Nombre moyen de neutrons émis par fission
- *Spectre de fission*  $\chi(E, E')$  : Proportion de neutrons émis à l'énergie  $E'$  suite à une fission induite par un neutron d'énergie  $E$  en  $MeV^{-1}$
- *Source*  $S(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}, t)$  : Émission de neutrons par unité de volume en  $\mathbf{r}$ , d'énergie  $E$ , d'angle solide dans la direction  $\mathbf{\Omega}$  et de temps  $t$  en  $cm^{-3}.MeV^{-1}.sr^{-1}.s^{-1}$

### 2.2.2 Grandeurs intervenant dans l'équation de transport

Avant de pouvoir expliciter l'équation de transport, on commence par présenter les grandeurs physiques fondamentales qui interviennent dans l'équation.

On définit tout d'abord la *densité de neutrons* en un point par la distribution

$$n(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}, t)$$

de manière à ce que  $n(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}, t) d^3r dE d^2\Omega$  représente à l'instant  $t$  le nombre de particules contenues dans l'élément de volume  $d^3r$  situé en  $\mathbf{r}$  à l'énergie  $E$  à  $dE$  près, et dans l'élément d'angle solide  $d^2\Omega$  autour de  $\mathbf{\Omega}$ .

On peut alors introduire la grandeur neutronique qui nous intéresse le plus, le *flux neutronique*. Celui-ci est défini de la manière suivante :

$$\phi(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}, t) = v n(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}, t)$$

où  $v$  est la vitesse du neutron exprimable de façon classique en fonction de son énergie cinétique :  $v = \sqrt{\frac{2E}{m}}$  car les neutrons ont des vitesses non relativistes dans un réacteur.

On utilise également le *flux scalaire* (flux intégré en  $\mathbf{\Omega}$ ) :

$$\phi(\mathbf{r}, E, t) = \int_{4\pi} \phi(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}, t) d^2\Omega \quad (2.2)$$

ainsi que le vecteur *courant neutronique* :

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}, t) = \mathbf{\Omega} \phi(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}, t) \quad (2.3)$$

### 2.2.3 Écriture de l'équation de transport

L'écriture de l'équation de transport s'obtient en appliquant l'équation de Boltzmann en considérant la population neutronique en interaction avec la matière environnante comme un gaz parfait. On réalise alors un bilan sur la population neutronique caractérisée par la densité neutronique sur un volume élémentaire  $d^3r dE d^2\Omega$ , à un instant  $t$  :

$$\frac{d}{dt} n(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}, t) = \text{apparition} - \text{disparition} \quad (2.4)$$

Les termes d'**apparition** et de **disparition** se décomposent de la manière suivante :

- **arrivée d'un neutron** de  $(\mathbf{r}, E', \mathbf{\Omega}', t)$  par diffusion
- **fission**



- **source extérieure**
- **fuite hors du domaine**
- **interaction avec un noyau du milieu** (absorption, diffusion)

En physique des réacteurs, on considère le réacteur dans un état quasi stationnaire afin de simplifier l'équation de transport et se débarrasser de la variable temporelle. L'équation de transport résume ci-dessous la vie du neutron dans un réacteur nucléaire :

$$[\mathbf{\Omega} \cdot \nabla + \Sigma]\phi = C\phi + F\phi + S_{ext} \quad (2.5)$$

- le terme  $\mathbf{\Omega} \cdot \nabla \phi$  exprime les *fuites neutroniques* en dehors du volume  $d^3r$  dans la direction  $\mathbf{\Omega}$
- $\Sigma$  la section efficace totale représente l'ensemble des interactions que peut subir le neutron
- $C$  ou opérateur de collision

$$C\phi(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}) = \int_0^\infty dE' \int_0^{4\pi} \Sigma_s(\mathbf{r}, (E', \mathbf{\Omega}') \rightarrow (E, \mathbf{\Omega})) \phi(\mathbf{r}, E', \mathbf{\Omega}') d^2\Omega' \quad (2.6)$$

$\Sigma_s$  est la section efficace de transfert :  $\Sigma_s(\mathbf{r}, (E', \mathbf{\Omega}') \rightarrow (E, \mathbf{\Omega})) dE' d^2\Omega'$  est la probabilité qu'une particule située en  $(\mathbf{r}, E', \mathbf{\Omega}')$  à  $dE' d^2\Omega'$  près subisse une collision et soit réémise en  $(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega})$

- $F$  ou opérateur de fission

$$F\phi(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}) = \sum_{j \in \text{isotopes fissiles}} \int_0^{4\pi} d^2\Omega \int_0^\infty \chi_j(E', E) \nu \Sigma_{f,j}(E')(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}, E', \mathbf{\Omega}') dE' \quad (2.7)$$

$\chi_j$  et  $\nu \Sigma_{f,j}$  sont respectivement le spectre de fission de l'isotope  $j$  et section efficace de fission de l'isotope  $j$  multipliée par le nombre moyen de neutrons émis lors de la fission de l'isotope  $j$  (multiplication par fission)

- $S_{ext}$  : éventuelle source externe

#### 2.2.4 Facteur de multiplication effectif

On peut réécrire la forme différentielle de l'équation de transport en état quasi-stationnaire de la manière suivante :

$$\mathbf{\Omega} \cdot \nabla \phi(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}) + \Sigma(\mathbf{r}, E) \phi(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}) = Q(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}) \quad (2.8)$$

Si maintenant on suppose que la fission est isotrope dans le référentiel d'étude alors on peut réécrire la densité de la source en état quasi-stationnaire :

$$Q(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}) = \int_0^{4\pi} d^2\Omega' \int_0^\infty \Sigma_s(\mathbf{r}, (E', \boldsymbol{\Omega}') \rightarrow (E, \boldsymbol{\Omega})) \phi(\mathbf{r}, E', \boldsymbol{\Omega}') dE' + \frac{1}{4\pi k_{eff}} Q^{fiss}(\mathbf{r}, E) \quad (2.9)$$

$$Q^{fiss}(\mathbf{r}, E) = \sum_{j \in \text{isotopes fissiles}} \int_0^\infty \chi_j(E', E) \nu \Sigma_{f,j}(\mathbf{r}, E') \phi(\mathbf{r}, E') dE' \quad (2.10)$$

On introduit ici le terme  $k_{eff}$  qu'on appelle le facteur de multiplication effectif. On divise la source de fission par ce terme dans l'intention de forcer un état stationnaire. En effet, si le taux d'absorption et de fuite de neutrons ne contrebalancent pas exactement le taux de production de neutrons alors la condition d'état quasi stationnaire n'est pas réalisée.

On distingue alors plusieurs cas suivant la valeur du  $k_{eff}$  :

- $k_{eff} < 1$  : la production est inférieure à la disparition, le réacteur est dit **sous-critique**
- $k_{eff} = 1$  : la condition d'équilibre est respectée, le réacteur est dit **critique**, c'est la condition qui est cherchée dans une centrale nucléaire.
- $k_{eff} > 1$  : la production est supérieure à la disparition, le réacteur est dit **sur-critique**.  
Si le facteur  $k_{eff}$  dépasse un certain seuil, le réacteur peut atteindre un état prompt-critique

Pour caractériser l'écart du  $k_{eff}$  par rapport à la criticité, on utilise la notion de **réactivité** notée  $\rho$  et définie de la manière suivante :

$$\rho = \frac{k_{eff} - 1}{k_{eff}} \quad (2.11)$$

Pour caractériser maintenant l'écart entre des  $k_{eff}$  différents  $k_1$  et  $k_2$  par exemple, on utilise l'écart en réactivité exprimé en *pcm* (pour cent milles) calculé via la formule (2.12).

$$\Delta\rho = \rho_2 - \rho_1 = \left( \frac{1}{k_1} - \frac{1}{k_2} \right) \times 10^5 \quad (2.12)$$

## 2.3 Résolution numérique de l'équation de transport stationnaire

### 2.3.1 Approche multigroupe

La résolution déterministe de l'équation de transport en état stationnaire s'appuie sur l'utilisation d'une discrétisation énergétique multigroupe. Cette approche consiste à diviser le maillage énergétique en un nombre  $G$  de groupes d'énergie. Sur chacun de ces  $G$  groupes d'énergie, on suppose que les neutrons ont une vitesse unique. On considère alors, sur chacun de ces groupes, la valeur moyenne des grandeurs intervenant dans l'équation de transport. C'est ce qu'on appelle l'approximation multigroupe.

On choisit en général l'énergie de référence  $E_0$  utilisée dans la définition de la léthargie de telle sorte qu'elle corresponde à l'énergie maximale des neutrons dans un réacteur nucléaire. La léthargie  $u = \ln(\frac{E_0}{E})$  est alors nulle pour cette énergie maximale et va donc augmenter quand les neutrons seront plus lents (basse énergie). On peut alors définir chacun des  $G$  groupes  $W_g$  du maillage énergétique de deux manières :

$$W_g = \{u; u_{g-1} \leq u < u_g\} = \{E; E_g < E \leq E_{g-1}\} \quad (2.13)$$

On définit la notion de valeur moyenne en léthargie pour une distribution  $X(E)$  de la manière suivante :

$$\langle X \rangle_g = \int_{u_{g-1}}^{u_g} du X(u) = \int_{E_g}^{E_{g-1}} dE X(E) \quad (2.14)$$

On définit la notion de valeur moyenne en léthargie pour une fonction  $X(E)$  de la manière suivante :

$$\langle X \rangle_g = \frac{1}{u_g - u_{g-1}} \int_{u_{g-1}}^{u_g} du X(u) = \frac{1}{\ln(E_{g-1}/E_g)} \int_{E_g}^{E_{g-1}} \frac{dE}{E} X(E) \quad (2.15)$$

### 2.3.2 Équation de transport stationnaire multigroupe

On applique cela à toutes les grandeurs présentes dans l'équation de transport stationnaire, on obtient alors l'équation de transport stationnaire multigroupe :

$$\Omega \cdot \nabla \phi_g(\mathbf{r}, \Omega) + \Sigma_g(\mathbf{r}) \phi_g(\mathbf{r}, E, \Omega) = Q_g(\mathbf{r}, \Omega) \quad (2.16)$$

On redéfinit alors chaque grandeur neutronique en tenant compte de cette approche multigroupe.

### Section totale multigroupe

$$\Sigma_g(\mathbf{r}) = \frac{1}{\phi_g(\mathbf{r})} \langle \Sigma(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}) \rangle_g \quad (2.17)$$

### Section de transfert multigroupe

$$\Sigma_{s,g \leftarrow h}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}') = \frac{1}{\phi_h(\mathbf{r})} \int_{E_g}^{E_{g-1}} \left( \int_{E_h}^{E_{h-1}} \Sigma_s(\mathbf{r}, E \leftarrow E', \boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}') \phi(\mathbf{r}, E') dE' \right) dE \quad (2.18)$$

### Spectre de fission multigroupe dépendant de l'énergie incidente

$$\chi_j^{g' \rightarrow g} \quad (2.19)$$

### Section nu-fission multigroupe

$$\nu \Sigma_{f,j,h}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\phi_h(\mathbf{r})} \int_{E_g}^{E_{g-1}} \nu \Sigma_{f,j}(\mathbf{r}, E) \phi(\mathbf{r}, E) dE \quad (2.20)$$

### Densité de source multigroupe

$$Q_g(\mathbf{r}, E) = \sum_{h=1}^G \int_{4\pi} \Sigma_{s,g \leftarrow h}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}') \phi_h(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}') d^2\Omega' + \frac{1}{4\pi k_{eff}} \sum_{j \in \text{isotope fissile}} \sum_{h=1}^G \chi_j^{h \rightarrow g} \nu \Sigma_{f,j,h}(\mathbf{r}) \phi_h(\mathbf{r}) \quad (2.21)$$

### 2.3.3 Notion de domaine et de conditions aux frontières

On considère un certain domaine  $V$  à l'intérieur duquel les neutrons peuvent se déplacer. Ce domaine est fini dans le cas où il est fermé par des frontières  $\partial V$ . Ainsi on doit appliquer des *conditions aux frontières* pour caractériser le comportement du flux neutronique aux limites du domaine étudié.

On définit un point quelconque de la frontière étudiée :  $\mathbf{r}_s$  ainsi que la normale sortante définie en ce point  $\mathbf{N}(\mathbf{r}_s)$ . La résolution de l'équation de transport dans le domaine  $V$  nécessite de connaître le flux entrant en  $\mathbf{r}_s$ . Ce flux est défini comme  $\phi_g(\mathbf{r}_s, \boldsymbol{\Omega})$  avec  $\boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{N}(\mathbf{r}_s) < 0$ . Différentes conditions sont possibles :

- **albedo** : proportionnalité entre le flux sortant et le flux entrant

$$\phi_g(\mathbf{r}_s, \boldsymbol{\Omega}) = \beta \phi_g(\mathbf{r}_s, \boldsymbol{\Omega}') \quad \text{avec} \quad \boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{N}(\mathbf{r}_s) < 0$$

où  $\beta$  est appelé l'albedo et  $\boldsymbol{\Omega}'$  est la direction du flux sortant

- **vide** : cas particulier d'albedo où  $\beta = 0$
- **réflexion** : cas particulier d'albedo où  $\beta = 1$

— **spéculaire** :

$$\boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{N}(\mathbf{r}_s) = -\boldsymbol{\Omega}' \cdot \mathbf{N}(\mathbf{r}_s) \quad \text{et} \quad (\boldsymbol{\Omega} \times \boldsymbol{\Omega}') \cdot \mathbf{N}(\mathbf{r}_s) = 0$$

— **blanche** : c'est un cas particulier de réflexion où toutes les particules qui touchent la frontière  $\partial V$  sont renvoyées de manière isotrope dans le domaine  $V$ .

$$\phi_g(\mathbf{r}_s, \boldsymbol{\Omega}) = \frac{\beta}{\pi} \int_{\boldsymbol{\Omega}' \cdot \mathbf{N}(\mathbf{r}_s) > 0} d^2\Omega' [\boldsymbol{\Omega}' \cdot \mathbf{N}(\mathbf{r}_s)] \phi_g(\mathbf{r}_s, \boldsymbol{\Omega}') \quad \text{avec} \quad \boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{N}(\mathbf{r}_s) < 0$$

— **périodique** : le flux au niveau d'une frontière est égal au flux au niveau d'une autre frontière, définie parallèlement à la première dans un réseau périodique.

$$\phi_g(\mathbf{r}_s, \boldsymbol{\Omega}) = \phi_g(\mathbf{r}_s + \Delta \mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega})$$

## 2.4 Quelques questions autour de l'équation de transport multigroupe

### 2.4.1 Forme caractéristique de l'équation de transport stationnaire multigroupe

On repart de l'équation de transport stationnaire multigroupe (2.16). La forme caractéristique de l'équation de transport multigroupe correspond à l'intégration de l'opérateur de courant :  $\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \phi_g$  le long d'une *caractéristique* de direction  $\boldsymbol{\Omega}$ . La localisation de la particule varie avec  $s$  (distance de la particule à la position de référence) selon l'équation suivante :  $\mathbf{r} + s\boldsymbol{\Omega}$ .

L'opérateur  $\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \phi_g$  peut être transformé en intégrant suivant  $s$ . Pour cela, on peut écrire que  $ds \boldsymbol{\Omega} = d\mathbf{r}$ , on obtient alors :

$$\frac{d}{ds} = \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \quad (2.22)$$

En utilisant l'égalité (2.22), on peut alors établir la *forme caractéristique arrière de l'équation de transport multigroupe* (écrite en  $\mathbf{r} + s\boldsymbol{\Omega}$ ) :

$$\frac{d}{ds} \phi_g(\mathbf{r} + s\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}) + \Sigma_g(\mathbf{r} + s\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}) \phi_g(\mathbf{r} + s\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}) = Q_g(\mathbf{r} + s\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}) \quad (2.23)$$

- $\mathbf{r}$  est le point de départ du neutron
- $s$  est la distance parcourue par le neutron le long de sa caractéristique
- $\boldsymbol{\Omega}$  est la direction de la caractéristique
- $\Sigma_g(\mathbf{r})$  est la section totale macroscopique en  $\mathbf{r}$  (pour le groupe  $g$ )
- $Q_g(\mathbf{r} + s\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega})$  est la source de neutrons (pour le groupe  $g$ )

On peut également établir la forme avant de l'équation de transport multigroupe :

$$-\frac{d}{ds}\phi_g(\mathbf{r} - s\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}) + \Sigma_g(\mathbf{r} - s\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega})\phi_g(\mathbf{r} - s\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}) = Q_g(\mathbf{r} - s\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}) \quad (2.24)$$

#### 2.4.2 Forme intégrale de l'équation de transport stationnaire multigroupe

On obtient la forme intégrale de l'équation de transport en intégrant le flux angulaire le long d'une caractéristique pour une source fixée  $Q$ . On commence par introduire un facteur intégration  $e^{-\tau_g(s)}$  défini par rapport à ce qu'on appelle le *parcours optique* :

$$\tau_g(s) = \int_0^s ds' \Sigma_g(\mathbf{r} - s'\boldsymbol{\Omega}) \quad (2.25)$$

On calcule la dérivée du produit du facteur d'intégration par le flux angulaire :

$$\frac{d}{ds}[e^{-\tau_g(s)}\phi_g(\mathbf{r} - s\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega})] = e^{-\tau_g(s)}[-\Sigma_g(\mathbf{r} - s\boldsymbol{\Omega})\phi_g(\mathbf{r} - s\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}) + \frac{d}{ds}\phi_g(\mathbf{r} - s\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega})] \quad (2.26)$$

On utilise le résultat (2.26) dans l'équation (2.24) et on obtient :

$$\frac{d}{ds}[e^{-\tau_g(s)}\phi_g(\mathbf{r} - s\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega})] = e^{-\tau_g(s)}Q_g(\mathbf{r} - s\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}) \quad (2.27)$$

On intègre alors (2.27) par rapport à  $s$  entre 0 et  $\infty$  pour obtenir la forme intégrale de l'équation de transport multigroupe dans le cas d'un domaine infini.

$$\phi_g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = \int_0^\infty e^{-\tau_g(s)}Q_g(\mathbf{r} - s\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega})ds \quad (2.28)$$

#### 2.4.3 Anisotropie de la diffusion

Dans l'équation du transport multigroupe, il faut modéliser la section de transfert multigroupe. Pour cela, on fait appel à une technique universalement utilisée dans les codes déterministes : développement en série finie de polynômes de Legendre.

On écrit alors la section de transfert sous la forme suivante :

$$\sigma_{sl}(E' \rightarrow E, \mu) = \sum_{l=0}^L \left(\frac{2l+1}{2}\right) \sigma_{sl}(E' \rightarrow E) P_l(\mu) \quad (2.29)$$

avec des moments de Legendre définis ainsi :

$$\sigma_{sl}(E' \rightarrow E) = \int_{-1}^1 \sigma_s(E' \rightarrow E, \mu) P_l(\mu) d\mu \quad (2.30)$$

Ici  $\mu$  correspond au cosinus de l'angle de diffusion dans le référentiel du laboratoire alors que  $E$  et  $E'$  correspondent aux énergies avant et après le choc.

Dans sa thèse (Callo (2012)), Ansar A. Callo a étudié le traitement de l'anisotropie du choc dans les codes déterministes. Il préconise notamment un développement à l'ordre 3 des sections de transfert dans les cellules MOX. Il montre que les polynômes de degré faible modélisent mal la forme piquée des sections de transfert, cet effet étant marqué pour des maillages fins et des noyaux légers.

## 2.5 Autoprotection des résonances

### 2.5.1 Description du phénomène physique d'autoprotection

Dans un milieu donné, le flux neutronique se creuse en fonction de l'énergie, et ceci est d'autant plus marqué que la section efficace du milieu (section macroscopique) est grande. Quand on calcule alors le taux de réaction pour le milieu et la réaction considérés, on observe alors une augmentation limitée au niveau de la résonance. C'est ce qu'on appelle le phénomène d'*autoprotection des résonances*.

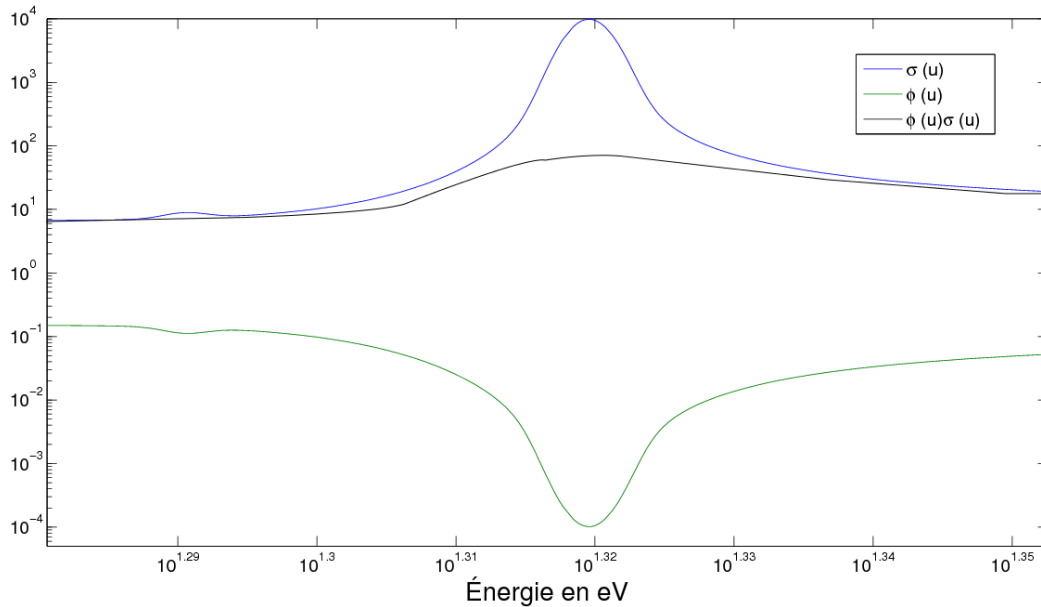


Figure 2.1 Phénomène d'autoprotection sur la résonance de l'U238 à 20.9 eV

### 2.5.2 Calcul des sections efficaces multigroupes autoprotégées

Si l'on calcule alors les sections efficaces multigroupes (voir précédemment) en utilisant le flux réel qui se creuse dans une résonance (comme illustré ci-dessus), on tient alors compte du phénomène d'autoprotection et on obtient alors des *sections efficaces multigroupes autoprotégées*. Le calcul d'autoprotection des résonances doit prendre en compte les nucléides résonnants

(dans le milieu étudié) ainsi que le domaine énergétique correspondant à la résonance.

L'enjeu du calcul d'autoprotection des résonances est très important. En effet, si l'on considère des sections efficaces non autoprotégées alors on risque de surestimer ou sous estimer les taux de réaction ainsi que le facteur de multiplication effectif. Par exemple, on obtient une surestimation d'un facteur 2 du taux d'absorption de l'U238 et une sous-estimation du  $k_{eff}$  de 25% dans le cas d'une cellule REP (Coste-Delclaux *et al.* (2013a)).

Les isotopes à autoprotéger vont également varier selon le type de concept de réacteur nucléaire que l'on étudie. Par exemple, dans un réacteur à neutrons thermiques, il est primordial de traiter les résonances d'absorption des noyaux lourds (Coste-Delclaux *et al.* (2013a)) quand dans un réacteur à neutrons rapides, il faudra également s'intéresser à la diffusion des noyaux légers (Na, Fe). Le calcul d'une section efficace autoprotégée se fait selon l'équation (2.31) :

$$\tilde{\sigma}_{x,i,g} = \mu_{i,g} \frac{\langle \sigma_x \phi_i \rangle_g}{\langle \phi_i \rangle_g} \quad (2.31)$$

- $\tilde{\sigma}_{x,i,g}$  est la section efficace microscopique autoprotégée pour une réaction  $x$  dans la région  $i$
- $i$  est l'indice de la région
- $g$  est l'indice du groupe énergétique
- $\mu_{i,g}$  est le facteur d'équivalence multigroupe
- $\phi_i$  est le flux scalaire dans la région  $i$

Le facteur d'équivalence multigroupe peut être pris égal à 1 si les groupes ont une largeur en léthargie inférieure à 0.1, ce qui est le cas avec les maillages utilisés dans cette étude (Hébert (2009b)). L'objectif du calcul d'autoprotection des résonances est de prendre en compte le creusement du flux lié à une résonance dans un certain groupe d'énergie. En effet, l'approche multigroupe, comme expliqué précédemment, nécessite de définir des valeurs moyennées des sections efficaces sur les groupes d'énergie. Il faut aussi préciser que pour les isotopes fissiles, on observe parfois plusieurs résonances dans un même groupe, cela renforce l'importance du calcul d'autoprotection. Nous allons aborder le formalisme de la méthode employée au cours du projet de recherche : la méthode des sous-groupes.

### 2.5.3 Tables de probabilité

Avant d'aborder la méthode des sous-groupes, il est important de faire un court rappel sur le formalisme mathématique des tables de probabilité.

Les tables de probabilité ont été introduites par les Russes et les Américains dans les années 1970. Puis, Pierre Ribon, dans **CALENDF**<sup>®</sup> (Sublet *et al.* (2011)), a développé un modèle basé sur des polynômes orthogonaux ainsi que la quadrature de Gauss.



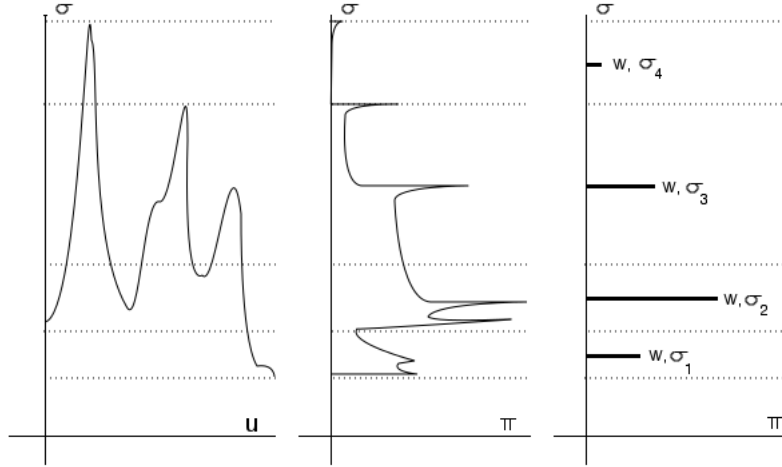


Figure 2.2 Représentation d'une section efficace et de ses résonances sous forme d'une table de probabilités

On cherche à calculer la moyenne d'une fonction  $f$  sur un domaine d'énergie  $g$ , sachant que cette fonction dépend de la section efficace  $\sigma_t^*$ , elle même dépendante de la léthargie  $u$ . On peut alors écrire la moyenne sous la forme suivante :

$$I = \frac{1}{u_g - u_{g-1}} \int_{u_{g-1}}^{u_g} f(\sigma_t^*) du \quad (2.32)$$

On peut alors transformer l'intégrale de Riemann en une intégrale de Lebesgue en faisant le changement de variable  $u \rightarrow \sigma$  :

$$I = \langle f(\sigma_t^*) \rangle_g = \int_0^{\max \sigma_t^*} f(\sigma_t^*) \Pi(\sigma_t^*) d\sigma_t^* \quad (2.33)$$

$\Pi(\sigma_t^*)$  est une densité de probabilité et  $\Pi(\sigma_t^*) d\sigma_t^*$  est la probabilité que la section efficace soit comprise entre  $\sigma_t^*$  et  $\sigma_t^* + d\sigma_t^*$ . Malheureusement, le calcul de la densité de probabilité peut parfois être très complexe. Pour contourner cette difficulté, on fait intervenir les quadratures de Gauss. On modélise la densité de probabilité  $\Pi$  par un ensemble de pics de Dirac  $\sigma_k$  ayant des poids  $\omega_k$  qui correspondent à l'importance de chacun de ces pics dans la densité globale. Les  $K$  couples  $(\sigma_i, \omega_i)$  sont calculés par une quadrature de Gauss par le code **CALENDF** et sont appelés *sous-groupes*.

L'obtention des tables de probabilité de cette manière n'est applicable que dans le domaine des résonances résolues. Dans le domaine non résolu, il est impossible de calculer les résonances théoriquement ou expérimentalement. Il s'agit alors de les simuler en utilisant des méthodes statistiques. Ce qui est fait actuellement est de modéliser les résonances dans le domaine non résolu à l'aide de la méthode Monte Carlo (méthode stochastique qu'on abordera à la

fin de ce chapitre). Pour cela, le physicien nucléaire utilise plusieurs jeux de paramètres de résonance aléatoires. Néanmoins, le physicien nucléaire a accès aux distributions et valeurs moyennes de ces paramètres. Il peut ainsi reproduire des expériences aléatoires et simuler un grand nombre d'expériences afin de reconstruire des résonances dans le domaine non résolu qui sera ensuite traité comme le domaine résolu. Le seul problème de la méthode Monte Carlo est le fait qu'elle est très gourmande en ressources de calcul.

#### 2.5.4 Méthode des sous-groupes ECCO

La méthode des sous-groupes utilisée par notre schéma de calcul APOLLO3 (TDT-CPM) est issue du code ECCO (Rimpault et al. (2002)). Elle est basée sur l'hypothèse suivante : les sections efficaces résonnantes et les sources de ralentissement sont décorréliées.

Cette hypothèse est vérifiée tant que l'on se situe dans le domaine non résolu ou dans un domaine d'énergie où le maillage énergétique est suffisamment fin (vérification de l'hypothèse d'une résonance dite "étroite"). Effectivement, pour nos calculs RNR, le maillage ECCO-1968 groupes est très fin et le domaine non-résolu est prépondérant. On fait également l'approximation de dire que la source autoprotégée est la source du groupe dans lui-même.

La méthode des sous-groupes héritée d'ECCO implémentée dans APOLLO3 peut fonctionner avec la méthode des probabilités de collision (TDT-Pij). Pour l'instant, la méthode des sous-groupes d'APOLLO3 n'utilise que les Pij. Des développements sont prévus pour pouvoir utiliser n'importe quel solveur. Dans notre schéma, la méthode des sous-groupes fonctionne grâce à TDT-Pij. Le solveur TDT-Pij du code APOLLO3 utilise deux types de méthode Pij : méthode exacte (utilisée ici) ou méthode à courants d'interface "multicell" (encore en développement pour le tube hexagonal RNR).

#### 2.5.5 Utilisation des tables de probabilité dans la méthode des sous-groupes

Les tables de probabilité utilisées dans APOLLO3 proviennent du code CALENDF (Sublet *et al.* (2011)). Il est prévu également d'utiliser des tables de probabilité pour les mélanges en les calculant à la volée à l'aide du module GALILEE (Coste-Delclaux (2008)).

Les propriétés des distributions de Dirac nous permettent d'écrire :

$$\langle f(\sigma_t^*(u)) \rangle_g = \int_0^{max\sigma_t^*} f(\sigma_t^*) \Pi(\sigma_t^*) d\sigma_t^* = \sum_{k=1}^K \omega_k \int_0^{max\sigma_t^*} f(\sigma_t^*) \delta(\sigma_t^* - \sigma_k) d\sigma_t^* = \sum_{k=1}^K \omega_k f(\sigma_k) \quad (2.34)$$

Ce qui donne, par exemple pour le calcul de flux pour la région  $i$  dans le groupe  $g$  ou le taux de collision :

$$\langle \phi_i(\mathbf{\Omega}, u) \rangle_g = \sum_{k=1}^K \omega_k \phi_{i,k}(\mathbf{\Omega}) \quad (2.35)$$

$$\langle \Sigma_{ti}(u) \phi_i(\mathbf{\Omega}, u) \rangle_g = \sum_{k=1}^K \omega_k \Sigma_{ti,k} \phi_{i,k}(\mathbf{\Omega}) \quad (2.36)$$

- $\phi_{i,k}(\mathbf{\Omega}) = \phi_i(\mathbf{\Omega}, \sigma_k)$  représente le flux du sous-groupe  $k$  dans la région  $i$
- $\Sigma_{ti,k} = \Sigma_{ti}^{g+} + N_i^* \sigma_k$  : on considère que les sections des autres noyaux (+) sont constantes sur  $g$ .  $\langle \Sigma_{ti}^+(u) \phi_i(\mathbf{\Omega}, u) \rangle_g = \Sigma_{ti}^{g+} \langle \phi_i(\mathbf{\Omega}, u) \rangle_g$

### 2.5.6 Méthode des probabilités de collision

La méthode des probabilités de collision résulte de la discrétisation de l'équation de transport intégrale multigroupe en supposant que les sources sont isotropes dans les sous-volumes. Il s'agit de la principale approximation pour la méthode exacte. L'approche multicellule apporte une nouvelle approximation, qui est l'isotropie et l'uniformité des courants d'interfaces, le but final étant de calculer des flux de manière approchée en résolvant l'équation de transport multigroupe stationnaire sous sa forme intégrale. Le formalisme utilisé ici reprend celui de Alain Hébert dans (Hébert (2009a)).

Pour un problème à  $I$  régions, la méthode des probabilités de collision produit une matrice de taille  $I \times I$  pour chaque groupe d'énergie. On utilise souvent cette méthode pour traiter des problèmes avec peu de régions avec des maillages non standards.

- Domaine infini (réseau de cellules identiques par exemple)
- Domaine fini (ajout de conditions aux frontières pour fermer un domaine)

On part de la forme intégrale de l'équation de transport multigroupe (2.28). On traite tout d'abord la composante angulaire du flux dans l'équation en intégrant par rapport à  $\mathbf{\Omega}$ , tout en gardant en tête l'hypothèse d'isotropie des sources :  $Q_g(\mathbf{r} - s\mathbf{\Omega}, \mathbf{\Omega}) = \frac{1}{4\pi} Q_g(\mathbf{r} - s\mathbf{\Omega})$

$$\phi_g(\mathbf{r}) = \int_{4\pi} d^2\Omega \phi_g(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) \quad (2.37)$$

$$= \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} d^2\Omega \int_0^\infty ds e^{-\tau_g(s)} Q_g(\mathbf{r} - s\mathbf{\Omega}) \quad (2.38)$$

On effectue le changement de variable suivant :  $\mathbf{r}' = \mathbf{r} - s\mathbf{\Omega}$  qui donne  $d^3r' = s^2 d^2\Omega ds$ . On obtient alors l'expression suivante pour le flux :

$$\phi_g(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \int_{\mathbb{R}} d^3r' \frac{e^{-\tau_g(s)}}{s^2} Q_g(\mathbf{r}') \quad (2.39)$$

Comme indiqué précédemment, on utilise souvent cette méthode de résolution pour travailler

sur un réseau infini (répétition de cellules élémentaires identiques). On se doit maintenant de séparer chaque motif élémentaire (cellule) en régions de calcul  $V_i$ . On note également l'ensemble des régions  $V_i$  dans les différents motifs élémentaires de la manière suivante :  $V_i^\infty$ . On suppose également que les sources de neutron secondaires sont uniformes et égales à  $Q_{i,g}$  dans chaque région  $V_i$ .

On intègre alors l'expression du flux  $\phi_g(\mathbf{r})$  sur chaque région :

$$\int_{V_j} d^3r \Sigma_g(\mathbf{r}) \phi_g(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \int_{V_j} d^3r \Sigma_g(\mathbf{r}) \sum_i Q_{i,g} \int_{V_i^\infty} d^3r' \frac{e^{-\tau_g(s)}}{s^2} Q_g(\mathbf{r}') \quad (2.40)$$

Ces sources de neutrons secondaires comportent deux termes uniformes : un terme de transfert et un terme de fission :

$$Q_{i,g} = \sum_h \Sigma_{s0,i,g \leftarrow h} \phi_{i,h} + \frac{1}{k_{eff}} Q_{i,g}^{fission} \quad (2.41)$$

$$Q_{i,g}^{fission} = \sum_{j \in \text{isotopes fissiles}} \chi_{j,g,i} \sum_h \nu \Sigma_{f,j,h,i} \phi_{i,h} \quad (2.42)$$

L'équation intégrale se simplifie alors de la manière suivante en introduisant les probabilités de collision  $P_{ij,g}$  :

$$V_j \Sigma_{j,g} \phi_{j,g} = \sum_i Q_{i,g} V_i P_{ij,g} \quad (2.43)$$

$$\phi_{j,g} = \frac{1}{V_j} \int_{V_j} d^3r \phi_g(\mathbf{r}) \quad (2.44)$$

$$\Sigma_{j,g} = \frac{1}{V_j \phi_{j,g}} \int_{V_j} d^3r \Sigma_g(\mathbf{r}) \phi_g(\mathbf{r}) \quad (2.45)$$

$$P_{ij,g} = \frac{1}{4\pi V_i} \int_{V_i^\infty} d^3r' \int_{V_j} d^3r \Sigma_g(r) \frac{e^{-\tau_g(s)}}{s^2} d^3r \quad (2.46)$$

La probabilité de collision  $P_{ij,g}$  correspond à la probabilité pour un neutron, né de façon uniforme et isotrope dans n'importe laquelle des régions  $V_i$  du réseau, de subir sa première collision dans la région  $V_j$  d'une cellule unitaire. En considérant que la section efficace totale  $\Sigma_g(r)$  est constante dans la région  $V_j$  et égale à  $\Sigma_{j,g}$ , on définit également des probabilités de collision réduites :

$$p_{ij,g} = \frac{P_{ij,g}}{\Sigma_{j,g}} = \frac{1}{4\pi V_i} \int_{V_i^\infty} d^3r' \int_{V_j} d^3r \frac{e^{-\tau_g(s)}}{s^2} \quad (2.47)$$

Dans le cas où la section dans la région  $j$  et le groupe  $g$   $\Sigma_{j,g}$  tend vers 0, les probabilités

réduites de collision restent néanmoins finies. Ceci permet le bon comportement de la méthode des probabilités de collision dans les régions vides du réseau de calcul. Les probabilités de collision possèdent d'autres propriétés, telles que la *réciprocité* et la *conservativité* :

$$p_{ij,g} V_i = p_{ji,g} V_j \quad (2.48)$$

$$\sum_j p_{ij,g} \Sigma_{j,g} = 1 \quad (2.49)$$

En utilisant la propriété de réciprocity, on peut alors simplifier l'équation 2.46 :

$$\phi_{i,g} = \sum_j Q_{j,g} p_{ij,g} \quad (2.50)$$

### 2.5.7 Tracking Pij

La méthode des Pij se décompose en 3 étapes :

1. Création d'un tracking appliqué à l'ensemble du réseau de calcul selon différents paramètres (nombre de pistes parallèles par cm, nombre d'angles horizontaux, etc...).
2. Calcul des PC par intégration numérique en utilisant les informations de tracking ainsi que les sections efficaces. Le calcul doit être fait pour chaque groupe d'énergie.
3. Calcul des flux intégrés et des taux de réaction dès que les PC ont été calculés

Le traçage constitue le socle du traitement de la géométrie dans le solveur TDT (solveur de flux pour le calcul réseau du code APOLLO3). Il ne contient que des données géométriques (angles, régions traversées, longueurs d'intersections correspondantes). Tout ceci est calculé une seule fois au début du calcul. Le traçage ne contient que ce qui est nécessaire au solveur TDT mais ne contient pas les détails de la géométrie (forme des régions, conditions aux limites, etc...). Il n'est qu'une transcription de tout cela. TDT-Pij, dans ce mémoire, sert à dénommer la méthode des Pij implémentée dans le solveur TDT.

Dans notre schéma de calcul APOLLO3, le tracking utilisé par le solveur TDT-Pij est un tracking dit cyclique, comme illustré à la figure 2.3, ce qui veut dire qu'on va imposer une condition réflexive spéculaire au niveau de notre géométrie de calcul. Dans ce cas, la trajectoire composée revient à son point de départ après une période finie, grâce à un choix judicieux de directions de la formule de quadrature angulaire.

### 2.5.8 Méthodes des sous-groupes avec probabilités de collision

L'expression de la forme intégrale pour le flux est la suivante :

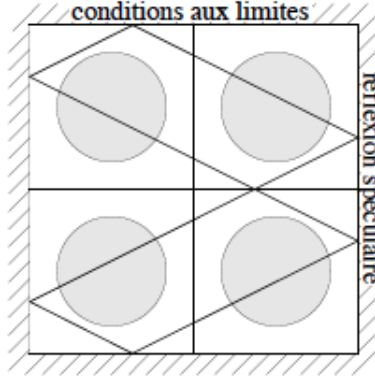


Figure 2.3 Schématisation d'une trajectoire cyclique dans une géométrie quelconque

$$\Phi_i(u) = \sum_j p_{ij}(u)(Q_{f,j}(u) + Q_{(n,xn),j}(u) + Q_{inel,j}(u) + R_j^+(\Phi_j(u)) + N_j^* r^*(\Phi_j(u))) = \sum_j p_{ij}(u) Q_j(u) \quad (2.51)$$

Dans le cadre de la méthode Pij, on a fait l'hypothèse de décorrélation des sources et des sections résonnantes (voir plus haut) :

$$\langle \Phi_i \rangle_g = \sum_j \langle p_{ij} \rangle_g \langle Q_j \rangle_g \quad (2.52)$$

$$\langle \sigma_\rho^* \Phi_i \rangle_g = \sum_j \langle \sigma_\rho^* p_{ij} \rangle_g \langle Q_j \rangle_g \quad (2.53)$$

On peut alors calculer la **section multigroupes autoprotégée** pour la réaction partielle  $\rho$  de la manière suivante :

$$\tilde{\sigma}_{\rho,i}^g = \frac{\langle \sigma_\rho^* \Phi_i \rangle_g}{\langle \Phi_i \rangle_g} = \frac{\sum_j \langle \sigma_\rho^* p_{ij} \rangle_g \langle Q_j \rangle_g}{\sum_j \langle p_{ij} \rangle_g \langle Q_j \rangle_g} = \frac{\sum_j (\sum_k \omega_k \sigma_{\rho,k} p_{ij,k})_g \langle Q_j \rangle_g}{\sum_j (\sum_k \omega_k p_{ij,k})_g \langle Q_j \rangle_g} \quad (2.54)$$

Les probabilités de collision sont calculées pour chaque pallier :  $p_{ij,k} = p_{ij}(\sigma_k)$ . La source complète  $\langle Q_j \rangle_g$  est mise à jour à chaque itération de puissance. La source de ralentissement élastique s'exprime par la somme de deux termes, respectivement responsables du ralentissement sur les isotopes résonnants et non résonnants :

$$\langle N_j^* r^* \rangle_g = \frac{1}{\Delta u_g} \sum_{g' \leq g} p_{x,\infty}^{g' \rightarrow g} \Delta u_{g'} \sum_k \langle \Sigma_{s,x,j} p_{ij,k} \rangle_{g'} \langle \tau_k \rangle_{g'} \quad (2.55)$$

$$\langle R_j^+ \rangle_g = \frac{1}{\Delta u^g} \sum_{g' \leq g} \Sigma_{s1j}^{g' \rightarrow g} \Delta u_{g'} \sum_k \langle p_{ij,k} \rangle_{g'} \langle \tau_k \rangle_{g'} \quad (2.56)$$

La source complète s'exprime alors de la manière suivante :

$$\begin{aligned} \langle Q_j \rangle_g &= \frac{1}{\Delta u^g} \sum_{g' \leq g} p_{x,\infty}^{g' \rightarrow g} \Delta u_{g'} \sum_k \langle \Sigma_{s0,x,j} p_{ij,k} \rangle_{g'} \langle \tau_k \rangle_{g'} \\ &+ \frac{1}{\Delta u^g} \sum_{g' \leq g} \Sigma_{s1j}^{g' \rightarrow g} \Delta u_{g'} \sum_k \langle p_{ij,k} \rangle_{g'} \langle \tau_k \rangle_{g'} + \langle Q_{f,j} + Q_{(n,xn),j} + Q_{inel,j} \rangle_g \end{aligned} \quad (2.57)$$

où  $\Delta u^g$  est la largeur en léthargie du groupe  $g$ ,  $p_{x,\infty}^{g' \rightarrow g}$  est la loi de choc à dilution infinie pour la diffusion isotrope sur un isotope résonnant,  $\Sigma_{s0,x,j}$  est la section efficace macroscopique de diffusion pour un isotope résonnant et  $\Sigma_{s0,j}^{g' \rightarrow g}$  est la section efficace macroscopique de transfert par diffusion isotrope pour un isotope non résonnant

### 2.5.9 Avantages et inconvénients de cette méthode

La méthode des sous-groupes d'APOLLO3 permet de résoudre l'équation de transport complète en évitant les approximations suivantes :

- Source de ralentissement purement élastique (APOLLO2, DRAGON)
- Hypothèse de structure fine (Livolt-Jeanpierre)

Cette méthode est donc adaptée au traitement du ralentissement inélastique et des réactions (n,xn). En ce qui concerne le domaine non résolu des résonances, le formalisme de cette méthode est particulièrement adaptée (hypothèse de décorrélation des sections résonnantes et des sources de ralentissement). Néanmoins, dans le domaine résolu, cette méthode nécessite l'utilisation d'un maillage énergétique suffisamment fin (le maillage à 1968 groupes d'ECCO par exemple). En effet, dans le domaine des basses énergies ( $E < 100 \text{ eV}$ ), la méthode des sous-groupes est peu adaptée, les sections efficaces sont fortement corrélées aux sources de ralentissement, il faut donc absolument utiliser un maillage énergétique très fin et optimisé afin de réduire les erreurs de traitement. Dans la partie supérieure du domaine résolu ( $100 \text{ eV} < E < 10 \text{ keV}$ ), un maillage énergétique fin et optimisé est également nécessaire.

## 2.6 Calcul du flux dans APOLLO3 : petit rappel sur le MOC

La *méthode des caractéristiques* (ou *Method of characteristics* en anglais, souvent abrégée en MOC ) s'emploie à résoudre la forme caractéristique de l'équation de transport(2.23) en suivant le trajet rectiligne d'un neutron dans le domaine étudié. La première implémentation

de cette méthode dans un code de calcul neutronique a été effectuée par M. J. Halsall dans le module CACTUS du code WIMS-E (Halsall (1980)) après avoir formulée par J. R. Askew en 1972 (Askew (1972)). Cette méthode a notamment été implémentée dans le module MCCG du code DRAGON4 (Le Tellier et Hébert (2006), Le Tellier (2006)). On présente ici la méthode des caractéristiques en se basant sur la formalisme utilisé dans (Coste-Delclaux *et al.* (2013b)).

Pour mettre en oeuvre cette méthode, on met en place une discrétisation spatiale et angulaire (ordonnées discrètes). On suppose que les sections efficaces sont constantes dans chaque région de calcul. Dans cette partie, qui présente de façon introductive le calcul MOC, on suppose pour simplifier que les sources sont constantes dans chaque région.

### 2.6.1 Équation de transmission

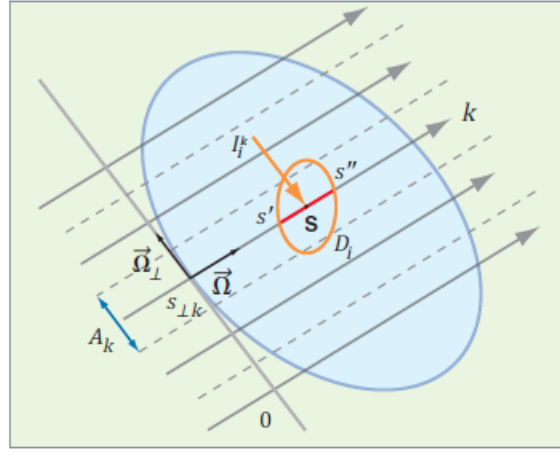


Figure 2.4 Discretisation en espace et en angle dans le MOC

Tout d'abord, on cherche à mettre en place l'équation de transmission. Pour cela, on commence par écrire l'équation de transport le long d'une caractéristique (voir figure 2.4) :

$$\frac{d}{ds}\phi(\mathbf{r}_{0k} + s\mathbf{\Omega}, \mathbf{\Omega}) + \Sigma(\mathbf{r}_{0k} + s\mathbf{\Omega})\phi(\mathbf{r}_{0k} + s\mathbf{\Omega}, \mathbf{\Omega}) = Q(\mathbf{r}_{0k} + s\mathbf{\Omega}, \mathbf{\Omega}) \quad (2.58)$$

En intégrant cette équation sur la région  $D_i$  le long de la caractéristique  $k$ , on obtient la solution de l'équation en  $\mathbf{r}_{0k} + s\mathbf{\Omega}$ . Cette solution est fonction du point d'entrée  $\mathbf{r}_{0k} + s'\mathbf{\Omega}$  selon l'équation suivante :

$$\phi(\mathbf{r}_{0k} + s\mathbf{\Omega}, \mathbf{\Omega}) = \phi(\mathbf{r}_{0k} + s'\mathbf{\Omega}, \mathbf{\Omega})e^{-\Sigma_i(s-s')} + \frac{q_i(\mathbf{\Omega})}{\Sigma_i}(1 - e^{-\Sigma_i(s-s')}) \quad (2.59)$$

Maintenant, si on choisit comme point courant le point de sortie  $\mathbf{r}_{0k} + s''\mathbf{\Omega}$  (voir figure 2.4)



situé dans la région  $D_i$ , on obtient une nouvelle équation appelée "équation de transmission" :

$$\phi(\mathbf{r}_{0k} + s''\mathbf{\Omega}, \mathbf{\Omega}) = \phi(\mathbf{r}_{0k} + s'\mathbf{\Omega}, \mathbf{\Omega})e^{-\Sigma_i(s''-s')} + \frac{1 - e^{-\Sigma_i(s''-s')}}{\Sigma_i} q_i(\mathbf{\Omega}) \quad (2.60)$$

### 2.6.2 Obtention du flux

On cherche ensuite à calculer le flux moyen le long de la trajectoire. Pour cela, on commence par moyenner l'équation 2.59 sur la caractéristique complète en faisant varier  $s$  entre  $s'$  et  $s''$ .

$$\bar{\phi}_i^k = \frac{\phi(\mathbf{r}_{0k} + s'\mathbf{\Omega}, \mathbf{\Omega}) - \phi(\mathbf{r}_{0k} + s''\mathbf{\Omega}, \mathbf{\Omega})}{\Sigma_i(s'' - s')} + \frac{q_i(\mathbf{\Omega})}{\Sigma_i} \quad (2.61)$$

Il nous reste à intégrer transversalement selon  $s_\perp$  afin d'obtenir le flux angulaire moyen dans la région  $D_i$  de volume  $V_i$  :

$$\bar{\phi}_i(\mathbf{\Omega}) = \frac{1}{V_i} \int dV \phi(s_\perp \mathbf{\Omega}_\perp + s\mathbf{\Omega}, \mathbf{\Omega}) = \frac{1}{V_i} \int ds_\perp \int ds \phi(s_\perp \mathbf{\Omega}_\perp + s\mathbf{\Omega}, \mathbf{\Omega}) \quad (2.62)$$

### 2.6.3 Tracking et temps de calcul

Les frontières des régions constituant notre géométrie de calcul permettent d'appliquer les équations de balayage (équation de transmission). Par contre, la discrétisation transverse est beaucoup plus complexe et fait appel à ce qu'on appelle le traçage ou "tracking". On définit un maillage transverse pour chaque angle  $\mathbf{\Omega}$  de la formule de quadrature. Le choix de la méthode de quadrature pour l'intégration transverse sera précisée dans la description fine du schéma de calcul.

Le choix d'un bon traçage est donc vital au bon traitement de la géométrie par le solveur MOC. Par ailleurs, il a fallu inventer des méthodes d'accélération compatibles avec le MOC afin du gagner du temps de calcul.

### 2.6.4 Tracking TDT-MOC dans notre schéma de calcul APOLLO3

Dans notre étude, nous considérons des réseaux infinis de motifs identiques (cellules, assemblages, ...). Ces réseaux infinis sont modélisés par des domaines fermés avec des conditions de réflexion spéculaire ou de translation. Un modèle de fuite en mode fondamental peut être imposé pour représenter les dimensions finies du réacteur. Dans ce travail de recherche, nous avons choisi d'utiliser des trajectoires cycliques, comme illustrées à la figure 2.3. La condition imposée est donc une réflexion spéculaire. Le tracking TDT-MOC est le même que le tracking TDT-Pij (en considérant des paramètres de tracking identiques). En effet, la géométrie et le tracking sont communs au solveur réseau TDT. Les paramètres de tracking TDT-MOC à prendre en compte dans notre schéma de calcul APOLLO3 sont donc les suivants :

- $\Delta r$  : intervalle entre deux caractéristiques
- $n_\phi$  : balayage azimuthal
- $n_\psi$  : balayage polaire

### 2.6.5 Comparaison Pij / MOC et influence sur le choix des paramètres de tracking

En résolvant la forme intégrale de l'équation de transport, la méthode des Pij fournit une matrice de probabilités de collision. Le calcul de cette matrice, comme pour la méthode des caractéristiques fait appel à un traçage de trajectoires parallèles pour un ensemble fini de directions angulaires. En géométrie 2D, la dépendance en angle est traitée par intégration numérique pour le MOC tandis que pour les Pij utilisent les fonctions de Bickley.

La méthode des Pij se heurte à deux problèmes :

- Hypothèse d'un choc isotrope et donc nécessité d'une correction du transport
- Utilisation d'une inversion directe d'une matrice par groupe d'énergie de taille  $N \times N$ , où  $N$  est le nombre de régions (matrices très grandes si grand nombre de régions)

En 2D, la méthode des Pij est une méthode plus coûteuse en temps de calcul que le MOC. Il faut donc utiliser des paramètres de tracking moins fins si l'on veut conserver un temps de calcul raisonnable. Au contraire, la méthode des caractéristiques est performante dans le cas d'un grand nombre de régions de calcul ou pour des calculs où l'anisotropie de la collision est importante.

## 2.7 Notion de schéma de calcul pour les codes déterministes

### 2.7.1 Données nucléaires

En amont du calcul neutronique, il est nécessaire de produire et de traiter les différents paramètres intervenant dans l'équation de transport : les sections efficaces, les multiplicités neutroniques ou les spectres. C'est ce qu'on appelle les *données nucléaires*. Tout d'abord, à partir des expériences et des modèles théoriques développés par les physiciens nucléaires, les évaluateurs produisent ce qu'on appelle des évaluations nucléaires. Ces fichiers contiennent les informations concernant les réactions nucléaires (induites par des photons ou des neutrons), les interactions électromagnétiques provoquées par des photons, la décroissance radioactive, les rendements de produit de fission (spontanée ou induite), le transport des particules chargées (protons, tritium, etc...), les incertitudes sur certaines de ces données. Chacun de ces items est lui-même une sous-bibliothèque. Par exemple, le premier item contient des sections efficaces, des paramètres de résonance, des distributions en énergie, etc...

En ce qui concerne le CEA, les codes de neutronique fonctionnent avec des bibliothèques principalement issues des évaluations JEFF (actuellement JEFF3.1.1). Le projet **JEF (Joint Evaluated File)** est un projet collaboratif apparu sous l’impulsion de l’**AEN** (Agence pour l’Énergie Nucléaire, OCDE) qui vise à regrouper les efforts européens et japonais afin de créer une base de données nucléaires communes. Par la suite, avec la fusion du projet JEF et du projet **EFF** (European Fusion File) est apparu **JEFF (Joint Evaluated Fission and Fusion File)**. La contribution du CEA à ce projet est très importante grâce à sa capacité à mener à la fois des projets d’électronucléaires civils ainsi que des expérimentations et vise à améliorer la base de données en vue des prochains gros projets : RJH, ASTRID, etc.. Le CEA assure ainsi une partie de la chaîne de production et de traitement des données nucléaires afin de proposer des bibliothèques de sections adaptées à chaque situation :

- Mesures microscopiques des sections efficaces
- Développement d’outils d’évaluation des données nucléaires afin d’améliorer la modélisation physique et l’estimation des incertitudes : utilisation du code **CONRAD** développé au LEPH (De Saint-Jean et al. (2007)).
- Évaluation des sections efficaces
- Traitement des données nucléaires pour utilisation dans les codes de neutronique appelé également *processing* par le code GALILEE qui met en communication les codes **NJOY** (MacFarlane *et al.* (2015)) et **CALENDF** (Sublet *et al.* (2011))

### 2.7.2 Calcul réseau, calcul coeur et schéma de calcul

La description fine de l’équation de transport dans un réacteur en énergie, angle et espace implique l’apparition de plus d’un million de milliards d’inconnues. Les ressources de calcul actuelles ne sont pas suffisantes pour traiter ce genre de problèmes : c’est pourquoi le neutronicien fait appel à des simplifications et des découplages particuliers propres au type de technologie étudiée. Le choix de ces simplifications et découplages est alors appelé *schéma de calcul*. Le calcul déterministe d’un réacteur nucléaire peut être effectué en deux étapes.

**Calcul réseau** : on l’appelle aussi calcul d’assemblage. C’est un calcul détaillé en espace et en énergie d’un motif élémentaire du coeur (assemblage fissile, barre de contrôle, etc...). Ce calcul tient donc compte de l’hétérogénéité du milieu avec quelques limitations : on considère que l’hétérogénéité est beaucoup plus radiale qu’axiale (calcul 2D). Ce calcul fin mène à une réduction du problème spatial en considérant une pâte plus au moins homogène équivalente au problème hétérogène d’entrée. C’est ce qu’on appelle l’**homogénéisation**. Elle est souvent accompagnée d’une réduction énergétique ou **condensation** (voir approche multigroupe). On obtient alors une bibliothèque de sections efficaces condensées et homogénéisées qui vont

servir au calcul coeur.

**Calcul de coeur** : ce calcul consiste à effectuer la résolution de l'équation de transport (exacte ou approchée) en remplaçant les motifs élémentaires hétérogènes du coeur par les pâtes homogènes élémentaires obtenues par le calcul réseau.

Dans ces deux étapes, le neutronicien détaille les solveurs numériques, les modèles, les discrétisations spatiale et énergétique nécessaires à la résolution avec une erreur acceptable de l'équation de transport. C'est ce qu'on appelle un **schéma de calcul**.

- Bibliothèques d'entrée (sections efficaces, tables de probabilité)
- Maillage énergétique (notion de groupes d'énergie)
- Géométrie d'entrée et composition isotopique des différents matériaux
- Autoprotection des résonances choisies (méthode d'autoprotection choisie, solveur numérique associé, paramètres de tracking)
- Calcul des flux dans le réseau étudié (solveur, paramètres de tracking)
- Homogénéisation et condensation choisies pour les données de sortie

## 2.8 Le code APOLLO3

### 2.8.1 Objectifs

Les nouveaux designs de coeur de réacteur (REP ou RNR par exemple), la volonté de réduire les biais amenés par les calculs déterministes et de mettre en place des calculs parallélisés afin de profiter des ressources de calcul (mémoire, nombre de coeurs) croissantes mettent en avant l'intérêt de renouveler les codes de calcul utilisés en physique des réacteur.

C'est ainsi que le CEA, supporté par EDF et AREVA, a décidé de moderniser sa plateforme d'applications constitué des éléments suivants : les codes déterministes APOLLO2 (Sanchez *et al.* (1988)), CRONOS2 (Sanchez *et al.* (1988)) et ERANOS (Rimpault *et al.* (2002)), le code Monte Carlo TRIPOLI4 (Diop *et al.* (2007)), le code d'évolution DARWIN3 (Tsilanizara *et al.* (1999)), le code de traitement de données nucléaires GALILEE (Coste-Delclaux (2008)) ainsi que l'outil d'analyse de réaction nucléaires et de calcul d'incertitude CONRAD (De Saint-Jean *et al.* (2007)).

APOLLO3 (Golfier *et al.* (2009)) est le dernier né de la famille des codes de calcul neutronique déterministes et sera le successeur des codes APOLLO2, CRONOS2 et ERANOS. Il doit répondre aux exigences suivantes :

- Flexibilité : calculs de haute précision jusqu'au design industriel
- Couplage avec des codes Monte Carlo et des codes de thermohydraulique / thermo-

mécanique

- Domaine d’application étendu : proposer un schéma de calcul multifilières (RNR, REP, réacteurs expérimentaux)
- Evaluation d’incertitude avec méthodes perturbatives
- Rester dans la continuité par rapport au système actuel tout en proposant de nouvelles fonctionnalités

### 2.8.2 Fonctionnalités et nouveautés

On présente ici les différentes fonctionnalités proposées début 2015 par le code APOLLO3.

**Autoprotection et solveurs de flux** : Le calcul réseau est effectué par le solveur TDT. Le code fournit des méthodes adaptées à tout type de spectre / réacteur (sous-groupes, Livolant-Jeanpierre). La principale amélioration est l’apparition de la parallélisation des calculs Pij. L’autoprotection est réalisée par le module CPM basé sur une méthode Pij (exacte ou multicellule) et de la méthode des sous-groupes du code ECCO (Rimpault et al. (2002)) couplé à un calcul de flux MOC. Les différents solveurs de flux sont présentés ci-dessous :

- **IDT** (Zmijarevic (1999)) : solveur 1D/2D/3D basé sur la méthode des ordonnées discrètes (SN) et la méthode des caractéristiques courtes ou la méthode nodale pour la variable spatiale. Il peut traiter les géométries homogènes cartésiennes structurées (quadrilatère) et hétérogène (type cellule)
- **MOC** (Sanchez et Chetaine (1999)) : solveur 2D/3D basé sur la méthode des caractéristiques longues qui peut traiter des géométries générales non structurées (intégré au solveur réseau TDT)
- **Pij** : solveur 2D basé sur la méthode exacte des probabilités de collision qui peut traiter des géométries générales non structurées (intégré au solveur réseau TDT)
- **MINOS** (Baudron et Lautard (2011)) : solveur 2D/3D SPN basé sur la méthode des éléments finis de Raviart-Thomas, permettant le traitement de géométries régulières cartésiennes ou hexagonales
- **MINARET** (Moller *et al.* (2011)) : solveur 2D/3D SN basé sur les éléments finis discontinus de Galerkin (2D triangulaire ou 3D prismatique) permettant le traitement de géométries avec maillage non structuré conforme

**Calcul cinétique et calcul en évolution** : APOLLO3 permet de réaliser des calculs de transitoire avec tous les solveurs de flux. Tous les paramètres cinétiques comme la fraction de

neutrons retardés sont fournies pour chaque calcul transitoire de cœur. Le solveur d'évolution MENDEL est un module commun à DARWIN3 et il est également couplé avec le code Monte Carlo TRIPOLI4.

**Contre-réactions et couplage neutronique / thermohydraulique** : La thermohydraulique du cœur est gérée par le code FLICA4 (Toumi *et al.* (2000)) couplé avec APOLLO3.

**Calcul de sensibilité et d'incertitude** : L'objectif principal est de fournir des modèles et des méthodes permettant d'étudier l'impact de différents types d'erreur d'entrée et différentes perturbations sur les paramètres de sûreté (criticité, coefficients de réactivité, composition isotopique du combustible irradié, etc...). Une méthode basée sur la théorie des perturbations généralisées avec la solution de l'équation adjointe du transport des neutrons sera implémentée dans tous les solveurs de flux d'ici fin 2015.

**Traitement du spectre de fission** : Dans le code NJOY, le spectre de fission est généré soit directement soit avec des matrices de production. Dans le second cas, le spectre de fission dépend de l'énergie du neutron incident. Dans APOLLO2, cet aspect était négligé, APOLLO3 apporte une modification en proposant un spectre de fission comportant 4 macro-groupes de fission. En effet, selon (Mosca *et al.* (2012)), les solveurs APOLLO2 ont été améliorés pour APOLLO3 afin de calculer la source de fission avec des spectres de fission tenant compte de la dépendance à l'énergie du neutron incident. Ceci a été réalisé afin de réduire les écarts en réactivité observés pour certaines configurations à neutrons rapides critiques (Mounier et Normand (2008)). Toujours selon (Mosca *et al.* (2012)), l'utilisation pour les spectres de fission de quatre macro-groupes optimisés selon l'énergie du neutron incident garantit une représentation correcte de la source de fission tout en gardant des bibliothèques multigroupes compactes et un temps de calcul raisonnable. Cette conclusion a été faite en se basant sur deux configurations : une sphère de Pu239 sans réflecteur et une cellule de réacteur rapide au sodium.

**Traitement de l'effet Doppler** : Dans les codes de traitement NJOY et CALENDF, les probabilités matricielles de transfert issues de la loi de choc sont supposées identiques quelle que soit la température. C'est le modèle « Asymptotic Kernel » ne considérant que le ralentissement du neutron. Deux améliorations sont proposées dans APOLLO3 (Sanchez *et al.* (2013), Sanchez (2015)) :

- Élargir la section de transfert complète (diffusion + renvois) en supposant la section de diffusion constante en énergie incidente du neutron (modèle "Constant Scattering" pour l'up-scattering non résonant)

- Traiter la dépendance énergétique (les résonances) selon le modèle « Choc Résonant ». Cette description rigoureuse permet de modifier le calcul de l'effet Doppler de 300 à 1200 K jusqu'à 10% (Sanchez *et al.* (2013)).

## 2.9 Schéma de calcul APOLLO3

### 2.9.1 Schéma de référence et schéma de projet

**Schéma de référence** : Le schéma de référence permet une utilisation optimale du code et de ses fonctionnalités. On définit ce schéma en faisant des analyses numériques (études de convergence) et physiques par rapport à des résultats Monte Carlo dits "étalons". Ces analyses permettent de quantifier les erreurs faites par APOLLO3.

**Schéma de projet** : Le schéma de projet cherche à optimiser le schéma de référence en vue d'une application industrielle particulière (ASTRID par exemple).

### 2.9.2 Description fine du schéma de calcul APOLLO3

On s'attache ici à décrire le schéma de calcul de référence utilisé dans le code APOLLO3.

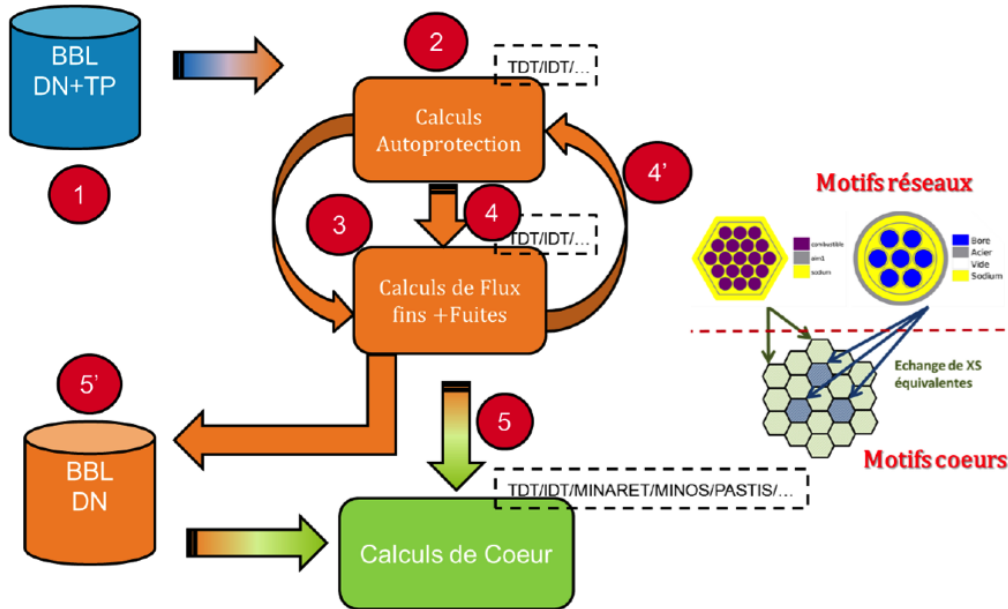


Figure 2.5 Schéma de calcul APOLLO3

On distingue sur la figure 2.5 le calcul réseau (en orange) du calcul coeur (en vert). Nous allons compléter ce schéma par une description fine et complète du schéma de calcul APOLLO3 utilisé au cours de la maîtrise.

## Bibliothèques et TP

On effectue le chargement des bibliothèques multigroupes de sections efficaces microscopiques et des TP associées (produites par CALENDF ET NJOY). Nous avons utilisé le maillage énergétique ECCO-1968 groupes. Les bibliothèques sont issues de l'évaluation JEFF3.1.1 (version CEAV512) et de JEFF3.2 (pour le Pu239). On charge également la géométrie et les compositions isotopiques.

## Autoprotection - Calcul flux

Le calcul d'autoprotection est réalisé par le module TDT-CPM (intégré au solveur TDT) en utilisant la méthode des sous-groupes d'ECCO basé sur le calcul des probabilités de collision exactes (TDT-Pij 2D exact). Les paramètres du tracking cyclique pour TDT-Pij sont les suivants ( $\Delta r = 0.1$  et  $n_\phi = 12$  pour le balayage polaire). L'autoprotection n'est pas réalisée avec mélange mais isotope par isotope (le calcul avec mélange est prévu). Les tables de probabilité isotopique sont fournies par CALENDF (par contre le calcul des tables de probabilité pour un mélange sera effectué à la volée dans APOLLO3 avec les outils du code GALILEE).

Le calcul d'autoprotection est couplé au calcul de flux : le flux groupe par groupe calculé par le MOC est réutilisé dans le calcul des sources lors d'un processus itératif permettant de déterminer les sections efficaces microscopiques autoprotégées. Les sections autoprotégées sont calculées à partir des probabilités de collision et des sources MOC (sources calculées à l'itération précédente). Les sections autoprotégées sont alors utilisées par le MOC pour calculer les flux et les sources de l'itération en cours.

TDT-Pij et TDT-MOC utilisent la même géométrie mais un tracking différent. Ils utilisent également le même maillage ECCO-1968 groupes. Ici, le calcul réseau est effectué sans modèle de fuites (en cours d'implémentation / vérification). L'anisotropie du choc est traitée en P0, P1 ou P3 dans TDT-MOC. Le tracking est basée sur une méthode de quadrature de Gauss-Legendre avec les paramètres suivants :

- Paramètres radiaux :  $\Delta r = 0.04$ ,  $n_\phi = 24$
- Paramètre azimuthal :  $n_\psi = 24$

## Condensation - homogénéisation

On effectue une homogénéisation partielle ou complète (choisie selon l'étude que l'on désire réaliser) et une condensation en énergie en utilisant le maillage énergétique 33 groupes d'ECCO-ERANOS.



On représente ici la boucle interne du calcul d'autoprotection. Cette boucle est située à l'intérieur du calcul à un groupe. Cette boucle interne itère sur tous les isotopes à autoprotéger. Le solveur flux MOC est couplé à l'autoprotection basée sur la méthode des sous-groupes. Le calcul itère jusqu'à ce que les sections efficaces microscopiques autoprotégées convergent ou les sources de diffusion du groupe sur lui-même convergent.

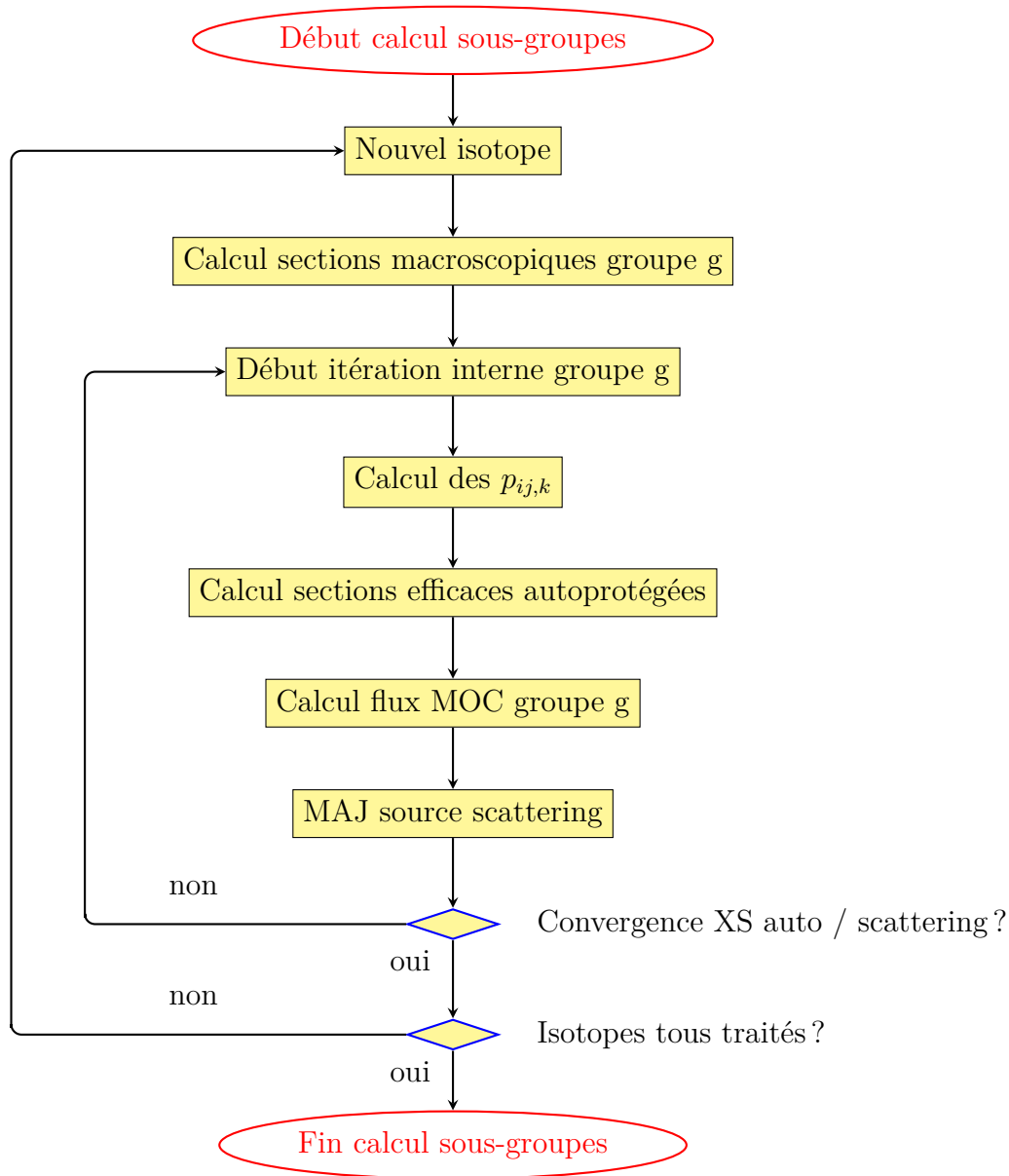


Figure 2.6 Boucle interne de la méthode des sous-groupes pour un groupe  $g$  quelconque

L'initialisation du calcul pour chaque groupe est faite avec les sections non autoprotégées. Le premier calcul de source est effectué avec le solveur DPN qui sert à l'accélération du MOC. L'autoprotection est réalisée pour chacun des groupes. Le calcul final MOC produit les flux scalaires à partir des sections efficaces autoprotégées convergées et permet de calculer les sources de "up/down-scattering".

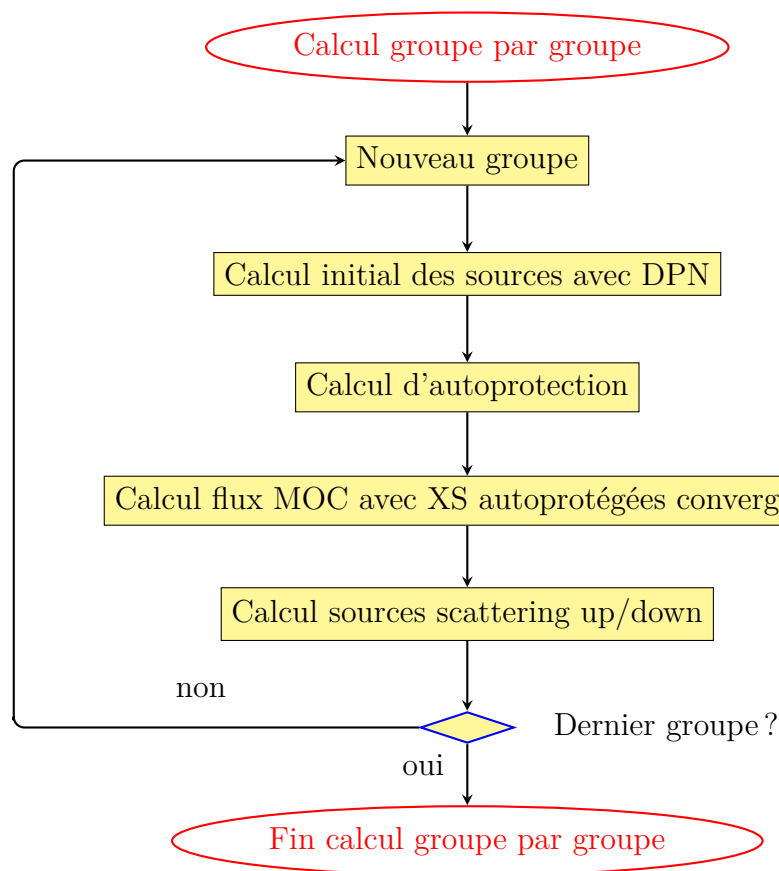


Figure 2.7 Calcul à un groupe

Enfin, on représente le calcul multigroupe final (itérations externes). On traite d'abord les groupes rapides et ensuite les groupes thermiques. Après le calcul des groupes rapides, on calcule les sources de ralentissement. Ensuite, on passe à l'itération sur les groupes thermiques. Le calcul des groupes thermiques est réalisé jusqu'à convergence des sources de "up-scattering". Enfin, si les sources de fission et le  $k_{eff}$  sont convergés, on arrête le calcul. Dans le cas contraire, on repart sur une autre itération externe.

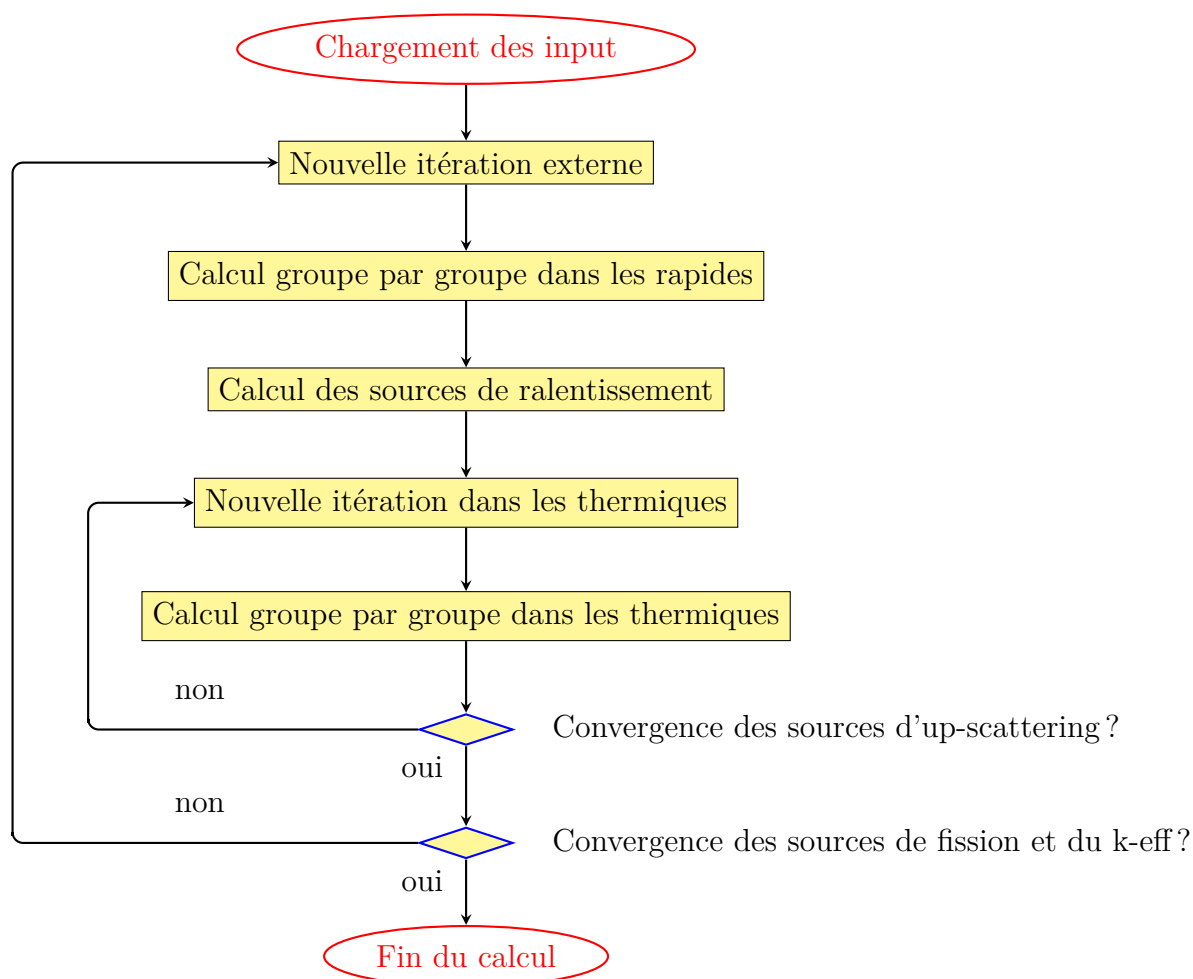


Figure 2.8 Calcul multigroupe

## 2.10 Calcul stochastique et méthode Monte Carlo

### 2.10.1 Introduction à la méthode Monte Carlo

La méthode Monte Carlo est une simulation du comportement des neutrons dans une certaine géométrie. Pour simuler les évènements qui ont lieu pendant la vie du neutron, on fait appel à des variables aléatoires (Hébert (2009a)). Cette méthode est dite stochastique. Elle fait appel à des générateurs de nombres aléatoires pour fonctionner. La méthode de Monte Carlo est un outil puissant permettant de valider les schémas de calculs, autant à burnup 0 qu'en situation d'évolution isotopique.

La vie du neutron est simulée depuis son apparition jusqu'à sa disparition, et on enregistre les différents interactions subies ou provoquées par le neutron au cours de son existence. Cette méthode est étendue à un grand nombre de neutrons afin de pouvoir compter sur la loi des grands nombres.

Le code Monte Carlo actuellement développé et utilisé au CEA est **TRIPOLI4**<sup>®</sup>. La précision des calculs faits avec ce genre de code nous permet de le considérer comme étalon et de l'utiliser en tant que tel pour valider les résultats obtenus par les codes déterministes.

### 2.10.2 Éléments de théorie des probabilités

On considère une variable aléatoire  $X$  défini sur un ensemble  $\Omega$  ainsi qu'une fonction  $f$  ayant  $X$  comme variable.  $f$  est donc également une variable aléatoire. On définit alors l'*espérance*, la *variance* et l'*écart-type* de  $f$  de la manière suivante :

$$\begin{aligned} E[f(X)] &= \int_{\Omega} dX p(X) f(X) \\ V[f(X)] &= \int_{\Omega} dX p(X) (f(X) - E[f(X)])^2 \\ \sigma[f(X)] &= \sqrt{V[f(X)]} = \sqrt{\int_{\Omega} dX p(X) (f(X) - E[f(X)])^2} \end{aligned}$$

On définit alors la fonction de répartition  $P$  comme étant la probabilité que  $X$  soit inférieure à  $x$  :

$$P(x) = \int_{-\infty}^x dX p(X) \quad (2.63)$$

De telle manière que :

$$p(X) = \frac{dP(X)}{dX} \quad (2.64)$$

En utilisant la définition (2.64), on obtient alors de nouvelles expressions pour l'espérance et la variance :

$$E[f(X)] = \int_{\Omega} dP(X) f(X) \quad (2.65)$$

$$V[f(X)] = \int_{\Omega} dP(X) \{f(X) - E[f(X)]\}^2 \quad (2.66)$$

On met alors en place ce qu'on appelle l'échantillonnage aléatoire. Cela consiste à obtenir des valeurs aléatoires de la fonction  $f(X)$  à partir de la densité de probabilité  $p(X)$ . Pour cela, on utilise une suite de nombre aléatoires  $r_n$  équirépartis entre 0 et 1 :

$$\begin{aligned} p(r_n) : \mathbb{R} &\longrightarrow \mathbb{R} \\ r &\longmapsto \begin{cases} 1 & \text{si } 0 \leq r \leq 1 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \end{aligned}$$

On utilise alors l'algorithme d'inversion pour passer de  $r_n$  à  $X$  en faisant appel à la fonction de répartition  $P$  :

$$P(X) = r_n \quad \rightarrow \quad X = P^{-1}(r_n) \quad (2.67)$$

Si l'on échantillonne un grand nombre de fois, on obtient alors :

$$E[f(X)] = \lim_{N \rightarrow \infty} E_N[f(X)] \quad \text{avec} \quad E_N[f(X)] = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N f(P^{-1}(r_n)) \quad (2.68)$$

En pratique, on utilise  $N$  très grand (au minimum de l'ordre du millier) dans les codes Monte Carlo. De la même manière, on peut estimer l'écart-type de la manière suivante :

$$\sigma[f(X)] = \lim_{N \rightarrow \infty} \sigma_N[f(X)] \quad \text{avec} \quad \sigma_N[f(X)] = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \{f(P^{-1}(r_n)) - E[f(X)]\}^2} \quad (2.69)$$

On définit la variable aléatoire  $\zeta_n = f(P^{-1}(r_n))$ , la moyenne  $\bar{\zeta} = E[f(X)]$  et la variance  $\sigma^2 = \sigma^2[f(X)]$ . On applique alors le théorème central limite. On considère la moyenne des variables aléatoires  $\zeta_n$  sachant qu'elles sont distribuées identiquement :

$$E_N(\zeta) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \zeta_i$$

Cette moyenne est alors elle-même une variable aléatoire avec une espérance  $\bar{\zeta} = E(\zeta)$  et d'écart type  $\frac{\sigma}{\sqrt{N}}$ . La densité de probabilité  $\phi(\zeta)$  est donc telle que  $\phi(\zeta)d\zeta$  soit la probabilité pour  $E_N(\zeta)$  d'avoir une valeur comprise entre  $\bar{\zeta}$  et  $\bar{\zeta} + d\zeta$  :

$$\phi(\zeta) = \frac{\sqrt{N}}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{N[\zeta - \bar{\zeta}]^2}{2\sigma^2}} \quad (2.70)$$

### 2.10.3 Simulation du comportement des neutrons

Le comportement des neutrons est simulé de l'apparition jusqu'à la disparition de ces derniers. Pour chaque neutron, on obtient alors ce qu'on appelle une marche aléatoire (*random walk* en anglais). Cela correspond au trajet effectué par le neutron entre les collisions qu'il subit, modélisé par des segments. Il est évident que ce trajet est affecté par la géométrie du domaine ainsi que par les sections efficaces des milieux traversés. Durant tout son trajet, le neutron est localisé spatialement (direction, position) et énergétiquement (énergies continues ou formalisme multigroupe) en étant affecté d'un poids statistique. Cette marche aléatoire est représentée par un algorithme.

### 2.10.4 Évaluation du k-effectif

La simulation Monte Carlo fonctionne sur un mode cyclique. La distribution de la source pour un cycle est donnée par la distribution de fission calculée au cycle précédent. Par ailleurs, chaque cycle correspond à une simulation mettant en jeu un certain nombre de neutrons, constituant ce qu'on appelle un *batch*, ces neutrons effectuant chacun une marche aléatoire. En général, le nombre de neutrons présents n'est pas le même au début et à la fin d'un cycle. On caractérise alors cette évolution par le facteur de multiplication effectif du cycle  $n$  :

$$k_{eff,n} = \frac{\text{nombre de neutrons source du cycle } n+1}{\text{nombre de neutrons source du cycle } n} \quad (2.71)$$

Par ailleurs, le choix de la source initiale n'est pas à prendre à la légère et doit être fait de manière à atteindre pleinement les matériaux fissiles dans la géométrie étudiée. Le nombre de cycles est important lui aussi : en effet, dans le but de réduire l'erreur statistique provoquée par l'estimation du  $k$  effectif, l'estimateur se charge de faire une moyenne des  $k_{eff}$  calculés pour chaque cycle. On se doit également de supprimer les premiers cycles afin de ne pas prendre en compte les  $k_{eff}$  estimés avant que la distribution de la source ne soit stabilisée :

on retire un certain nombre  $I_c$  de cycles appelés *cycles inactifs*.

$$k_{eff} = \frac{1}{N - I_c} \sum_{I_c+1}^N k_{eff,n} \quad (2.72)$$

### 2.10.5 Estimation des taux de réaction

Rappelons la définition du taux de réaction :

$$R_{x,D,\Delta E} = \int_D d^3 r \int_{\Delta E} dE \Sigma_x(\mathbf{r}, E) \phi(\mathbf{r}, E) \quad (2.73)$$

- $D$  est le domaine spatial considéré
- $\Delta E$  est le domaine énergétique
- $\phi$  est le flux scalaire
- $\Sigma_x$  est la section macroscopique pour la réaction  $x$

#### Estimateur analogue

Si l'on considère une simulation Monte Carlo, l'estimation de cette intégrale peut se faire en comptant les occurrences de cette réaction au cours de la marche aléatoire de chaque neutron simulé. L'estimateur associée à cette méthode de comptage réelle est appelé l'estimateur *analogue*. A savoir qu'il faut prendre en compte le poids statistique de la dite particule au moment de la collision :

$$R_{analogue,x,D,\Delta E} = \sum_{i=1}^I \omega_i \quad (2.74)$$

#### Estimateur collision

On peut également estimer le taux de réaction en sommant les sections efficaces partielles : c'est ce qu'on appelle l'estimateur *collision*.

$$R_{collision,x,D,\Delta E} = \sum_{i=1}^I \omega_i \frac{\Sigma_{x,g,k}}{\Sigma_{g,k}} \quad (2.75)$$

$k$  et  $g$  correspondent respectivement à la localisation spatiale et énergétique de la particule. Cet estimateur est plus efficace car il prend en compte les cas où la réaction  $x$  n'a pas lieu.

### Estimateur track-length

On sait que le flux intégré correspond au chemin parcouru par l'ensemble des particules dans un domaine particulier durant un certain temps. L'estimateur *track-length* enregistre les chemins parcourus entre des collisions réelles ou virtuelles et produit alors une estimation du flux :

$$F = \sum_{i=1}^{I_D} \omega_i \Delta L_i \quad (2.76)$$

- $I_D$  correspond aux particules qui traversent le domaine spatial  $D$
- $\Delta L_i$  correspond aux chemins appartenant au domaine spatial  $D$

A partir du flux estimé, on peut produire une estimation du taux de réaction :

$$R_{track,x,D,\Delta E} = \sum_{i=1}^{I_D} \omega_i \Sigma_{x,g,k} \Delta L_i \quad (2.77)$$



## CHAPITRE 3 Configuration cellule à burnup nul

Dans ce chapitre, nous allons présenter les différents résultats de validation obtenus pour un motif élémentaire de type cellule.

### 3.1 Impact de la configuration de la pastille

#### 3.1.1 Présentation des différentes configurations possibles

On commence par s'intéresser à la configuration géométrique de la pastille en comparant 3 géométries différentes. On indique les coefficients correspondant à la dilution du MOX pour les différentes géométries. Il faut savoir que le coefficient 95.5% correspond à la porosité du combustible, due au processus de fabrication des aiguilles (compactage). Les configurations sont illustrées par la figure 3.1.

- **Exacte** : comporte un vide au centre (95.5%)
- **Standard** : le vide central n'est pas modélisé, le combustible est dilué et contenu dans une pastille cylindrique (89.0266%)
- **Sans gap** : le vide entre le crayon et la gaine est incorporé au combustible qui voit sa densité diminuer (83.9836%)

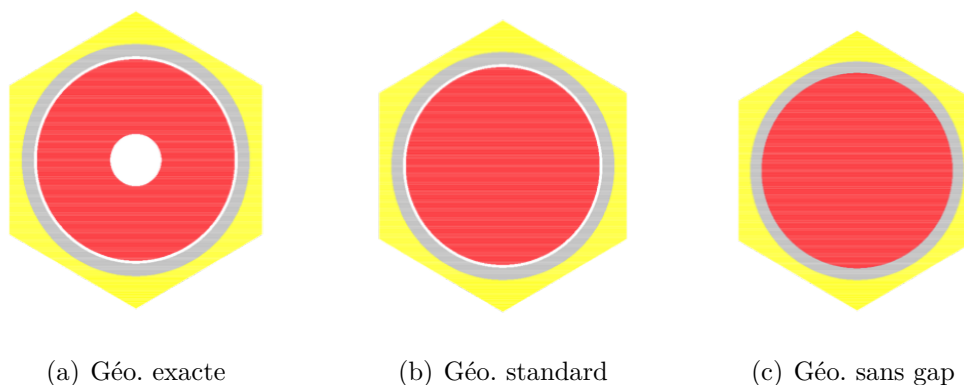


Figure 3.1 Illustration des 3 configurations géométriques

### 3.1.2 Comportement des codes de simulation selon la configuration géométrique

La premier étape consiste à évaluer l'impact de telles approximations géométriques sur le comportement des solveurs. En effet, il est possible que l'apparition de milieux dits "vide" engendre des difficultés dans le solveur de flux MOC d'APOLLO3. On compare donc les  $k_{eff}$  obtenus pour APOLLO3 et le code stochastique de référence TRIPOLI4. Pour information, on a indiqué également les résultats ECCO qui fait une hypothèse de cylindrisation de la cellule pour un traitement par la méthode des probabilités de collision.

L'information reportée dans le tableau 3.1 est l'écart en réactivité,  $\Delta\rho$ , calculé via la formule (2.12).

On précise que les calculs TRIPOLI4 présentent ici une erreur à 1-sigma de 2 pcm pour le  $k_{eff}$ . Il faut donc tenir compte de cette erreur dans notre appréciation des résultats. On calcule ici l'écart en réactivité entre deux géométries pour différents codes de calcul (ECCO, TRIPOLI4 et APOLLO3). Dans le tableau 3.1, la mention "T4" fait référence à TRIPOLI4 tandis que la mention "AP3-4MG" fait référence au code APOLLO3 (avec un spectre de fission à 4 macro-groupes). Ce type de référence sera utilisé tout au long du mémoire.

Tableau 3.1 Comparaison des différentes configurations géométriques

| Géométrie         | $\Delta\rho(\text{T4})$ | $\Delta\rho(\text{ECCO})$ | $\Delta\rho(\text{AP3-4MG})$ |
|-------------------|-------------------------|---------------------------|------------------------------|
| Standard / Exacte | 1                       | 2                         | 1                            |
| Sans gap / Exacte | -2                      | -3                        | -3                           |

Compte tenu de la précision statistique, les écarts calculés pour le code TRIPOLI4 sont insignifiants. Par ailleurs, en ce qui concerne les codes déterministes (APOLLO3 et ECCO), on voit que le choix de la configuration a peu d'influence sur le comportement des solveurs.

### 3.1.3 Zoom sur les taux de réaction TRIPOLI4

On retrouve aux figures 3.2 et 3.3 les taux de réaction (fission / capture) obtenus pour les deux isotopes prépondérants (U238 et Pu239) ainsi que les écarts absolus en pcm entre les taux de réaction pour les différentes géométries. Dans toute l'étude de validation, les taux de réaction sont intégrés en énergie et en volume et sont exprimés en  $s^{-1}$ . Ils sont également normalisés à  $k_{eff} = T_{production}$  où  $T_{production}$  est le taux de production global. Les taux de réaction et le flux moyen sont tracés pour les 24 premiers groupes du maillage à 33 groupes ECCO/ERANOS présenté en annexe (voir tableau A.1).

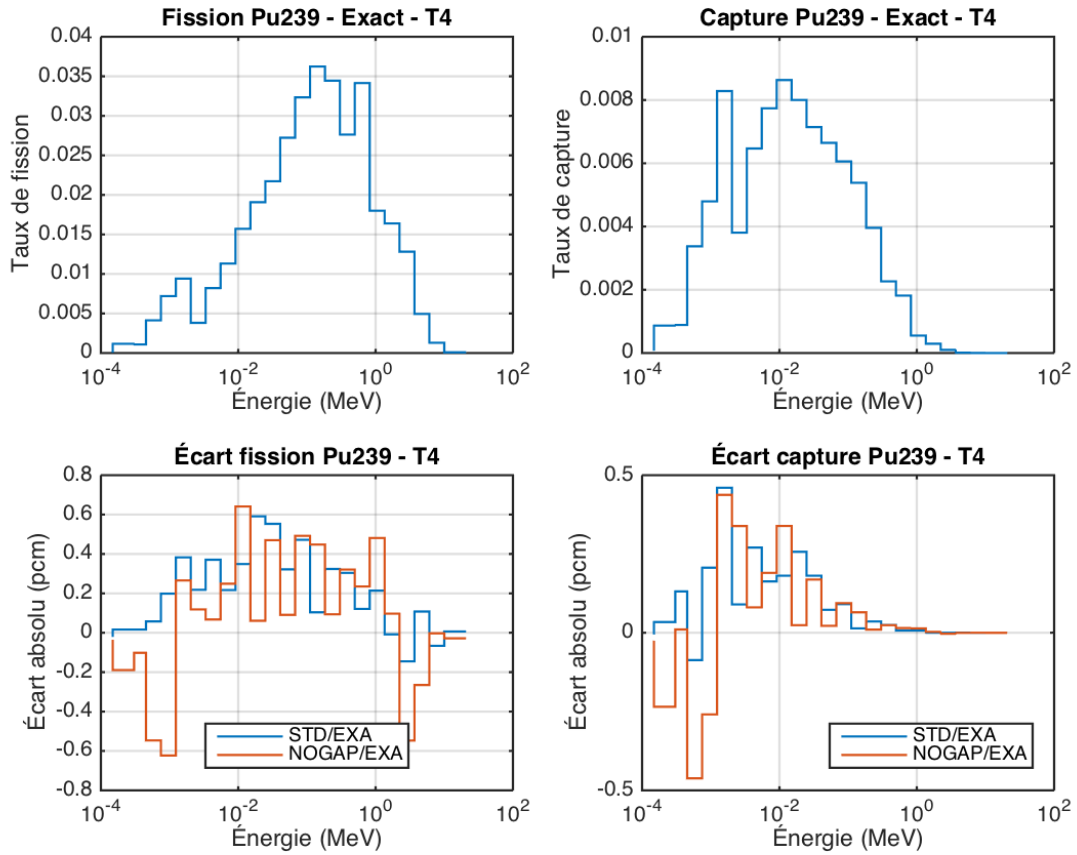


Figure 3.2 Taux de réaction - Pu239

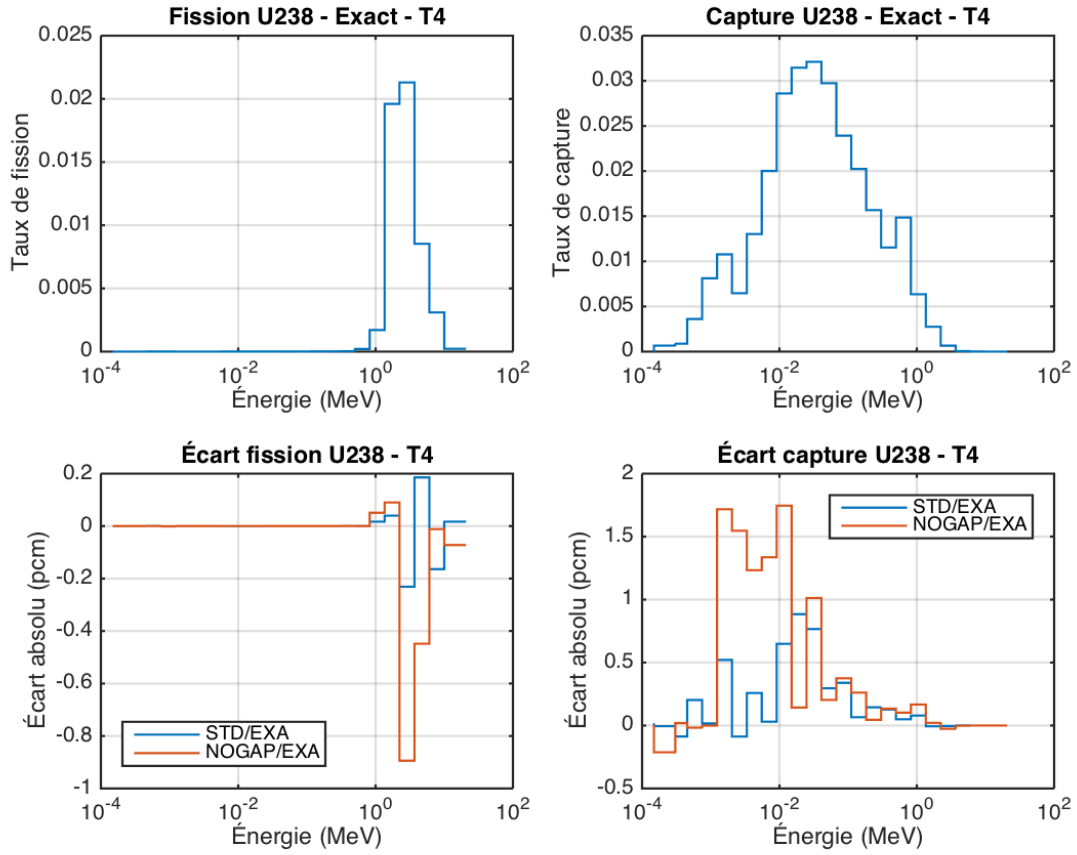


Figure 3.3 Taux de réaction - U238

On remarque que les écarts absolus en pcm entre les taux de réaction pour les différentes géométries sont très faibles voire insignifiants comparés aux incertitudes TRIPOLI4. On observe néanmoins un certain nombre de compensations qui apparaissent avec la géométrie sans gap. Il faut donc garder la même direction de travail, c'est à dire travailler sur la géométrie standard. En gardant cette géométrie (c'est celle qui a été retenue au CEA dans les études de définition du réacteur ASTRID), on garde des milieux vides et ainsi une opportunité de tester le comportement des solveurs de flux dans ces milieux.

### 3.2 Étude complète de la géométrie standard

À partir de maintenant, on va donc se limiter à la géométrie standard. Cela va nous permettre de rentrer plus dans le détail de la validation.

#### 3.2.1 Comparaison globale

Ici sont présentés les résultats obtenus pour APOLLO3 et TRIPOLI4. Une distinction est faite entre les calculs APOLLO3 effectués avec et sans macrogroupes de fission (respectivement nommés APOLLO3-4MG et APOLLO3-1MG). Les macrogroupes de fission permettent de prendre en compte la dépendance du spectre de fission en énergie incidente du neutron.

Tableau 3.2 Comparaison des  $k_{eff}$  sur la géométrie standard

| Calcul      | $k_{eff}$           | $\Delta\rho$ (AP3/T4) |
|-------------|---------------------|-----------------------|
| TRIPOLI4    | $1,55801 \pm 2$ pcm |                       |
| APOLLO3-4MG | 1,55842             | 17                    |
| APOLLO3-1MG | 1,55747             | -22                   |

À première vue, le spectre de fission à 4 macro-groupes permet une légère diminution de l'écart en réactivité entre APOLLO3 et TRIPOLI4. Nous devons néanmoins analyser plus en détail les taux de réaction isotopiques afin d'observer d'éventuelles compensations.

Dans toute la suite de l'étude, les flux moyens sont normalisés de la même manière que les taux de réaction ( $k_{eff} = T_{production}$  où  $T_{production}$  est le taux de production global). Le flux moyen normalisé  $\phi_{moy,norm}$  est calculé de la manière suivante :

$$\phi_{moy,norm} = \phi_{moy} \times \frac{k_{eff}}{T_{production}} \quad (3.1)$$

### 3.2.2 Flux moyen et taux de réaction isotopiques

On trace les taux de fission et de capture pour le Pu239 et l'U238 afin d'observer les effets de l'utilisation du spectre de fission à 4 macrogroupes. On trace également le flux moyen dans la pastille de combustible ainsi que l'écart relatif (APOLLO3 , TRIPOLI4) afin d'identifier la provenance des écarts (flux, autoprotection ou données nucléaires).

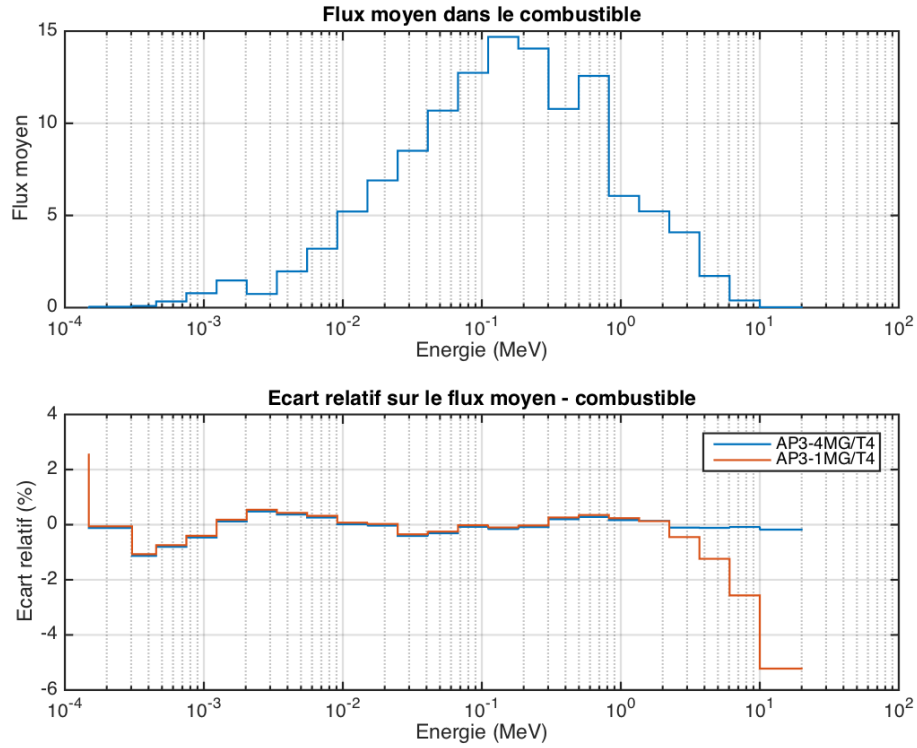


Figure 3.4 Flux moyen dans le combustible

Le flux moyen dans le combustible calculé par TRIPOLI4 dans les 10 premiers groupes d'énergies est convergé en relatif à mieux que 0.08% à  $1\sigma$ . Si l'on observe l'écart relatif APOLLO3 / TRIPOLI4 sur le flux moyen pour les groupes d'énergie où il est significatif (entre 10 keV et 1 MeV), on voit qu'il est relativement faible (moins de 0.5%). En ce qui concerne les hautes énergies (ici au dessus de 2 MeV), on voit que l'utilisation d'un spectre de fission à 4 macrogroupes dans le calcul APOLLO3 permet d'annuler l'écart relatif avec TRIPOLI4.

Les 3 premiers macro-groupes de spectre de fission concernent les groupes rapides : on s'attend donc à une modification du spectre de flux au-dessus du MeV et c'est bien ce qu'on observe. De manière générale dans notre étude, tous les flux calculés pour les 24 premiers groupes sont convergés en relatif à mieux que 0.1% à  $1\sigma$ .

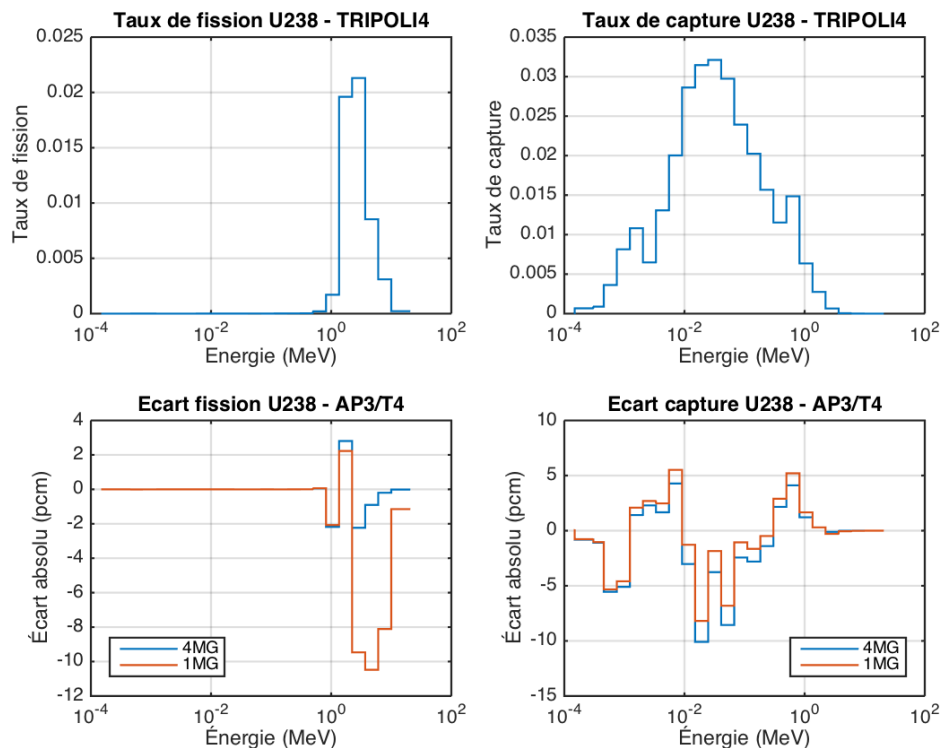


Figure 3.5 Taux de fission et de capture de l'U238

On observe une amélioration significative du calcul du taux de fission de l'U238 apportée par l'utilisation du spectre de fission à 4 macrogroupes. La modification du spectre de flux entraîne une augmentation des fissions (à seuil) de l'U238 (d'où la réduction des biais par rapport à TRIPOLI4).

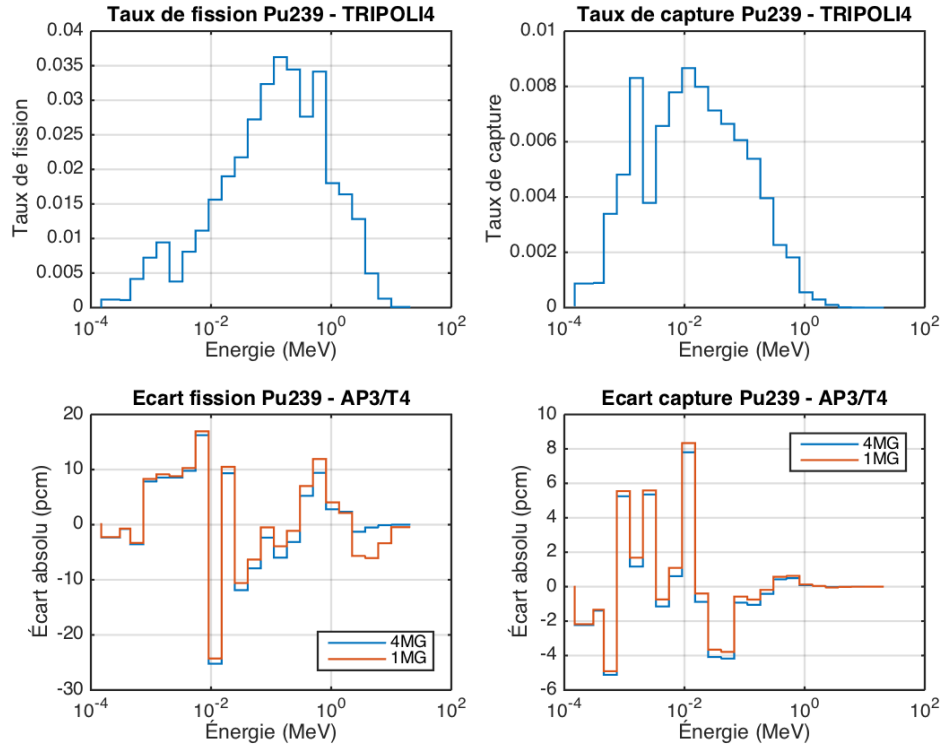


Figure 3.6 Taux de fission et de capture du Pu239

Les écarts relatifs entre APOLLO3 et TRIPOLI4 sur les taux de convergence sont toujours bien supérieurs à l'erreur relative à  $1\sigma$  obtenue avec TRIPOLI4. Dans la suite du mémoire, on précisera si les résultats ne sont pas significatifs à cause de l'erreur de convergence de TRIPOLI4. En ce qui concerne le PU239, il y a peu très peu de différence entre les deux calculs APOLLO3. Néanmoins, on observe un écart significatif sur la fission du Pu239 à la limite du domaine non-résolu. On reviendra sur ce point plus loin dans ce mémoire.



### 3.3 Étude des effets de vidange

#### 3.3.1 Effet de vidange

On a vu dans le chapitre 1 (1.2.3) que l'effet de vidange est un sujet primordial pour la conception du coeur d'ASTRID. On va donc simuler une vidange sodium en la modélisant par une dilution de la concentration en Na23. À partir de là, pour différentes dilutions, on fera une étude macroscopique et isotopique afin de s'assurer du bon comportement des solveurs d'APOLLO3. Le but de cette étude est de montrer que la dilution ne provoque pas d'augmentation significative des écarts entre APOLLO3 et TRIPOLI4.

#### 3.3.2 Comportement des codes APOLLO3 et TRIPOLI4 en vidange

On compile les résultats des calculs APOLLO3 et TRIPOLI4 dans les tableaux ci-dessous.

Tableau 3.3 Résultats obtenus pour différentes dilutions

| DILUTION | TRIPOLI4            | APOLLO3-4MG | APOLLO3-1MG |
|----------|---------------------|-------------|-------------|
| 1        | 1,55801 $\pm$ 2 pcm | 1,55842     | 1,55747     |
| 1/2      | 1,57906 $\pm$ 2 pcm | 1,57952     | 1,57854     |
| 1/10     | 1,59815 $\pm$ 2 pcm | 1,59855     | 1,59754     |
| 1/100    | 1,60342 $\pm$ 2 pcm | 1,60362     | 1,60261     |

Tableau 3.4 Écarts en réactivité APOLLO3 / TRIPOLI4 pour différentes dilutions

| DILUTION | $\Delta\rho$ (AP3-4MG/T4) | $\Delta\rho$ (AP3-1MG/T4) |
|----------|---------------------------|---------------------------|
| 1        | 17                        | -22                       |
| 1/2      | 18                        | -21                       |
| 1/10     | 16                        | -24                       |
| 1/100    | 8                         | -32                       |

Dans le tableau 3.4, on remarque que les écarts en réactivité entre APOLLO3 et TRIPOLI4 ne varient quasiment pas avec la vidange. Cela signifie que la vidange (l'écart en réactivité qui en découle) est bien traitée par le code APOLLO3.

On calcule également les écarts en réactivité entre les différents cas vidangés et le cas non-vidangé, et ceci pour APOLLO3 et TRIPOLI4. Le but est de vérifier la cohérence entre les résultats du code APOLLO3 ceux du code TRIPOLI4 pour le calcul de l'effet de vidange.

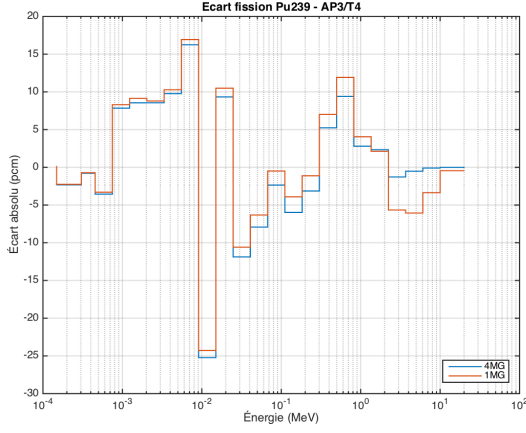
Tableau 3.5 Écarts en réactivité entre les cas vidangés et le cas non-vidangé calculés pour chaque code

| DILUTION | $\Delta\rho$ TRIPOLI4 | $\Delta\rho$ AP3-4MG | $\Delta\rho$ AP3-1MG |
|----------|-----------------------|----------------------|----------------------|
| 1/2      | 855                   | 857                  | 857                  |
| 1/10     | 1612                  | 1611                 | 1610                 |
| 1/100    | 1818                  | 1809                 | 1808                 |

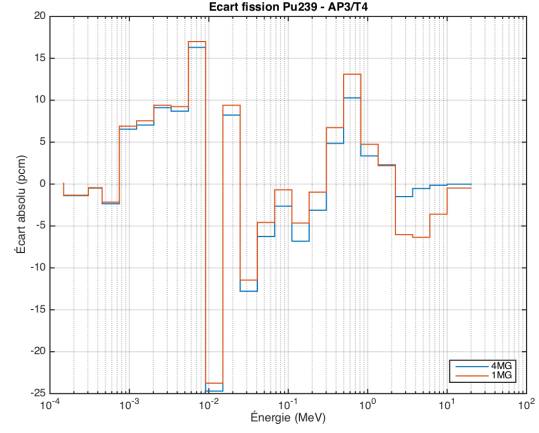
L'effet de vidange observé dans le tableau 3.5 est sensiblement le même que ce soit avec APOLLO3 (avec macrogroupes ou non) ou TRIPOLI4 et ceci pour des vidanges plus ou moins importantes (\*0.5 , \*0.1, \*0.01).

### 3.3.3 Traitement de la fission du Pu239 en vidange

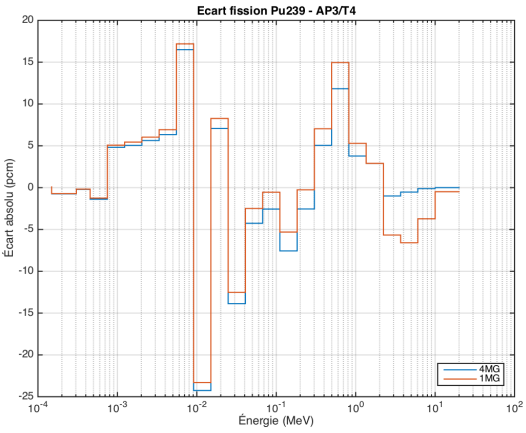
Pour finir sur l'étude de l'effet de vidange, on se propose de tracer le taux de fission du Pu239 selon la dilution, afin de s'assurer que la vidange n'a que peu d'influence sur le traitement numérique effectué par le code APOLLO3.



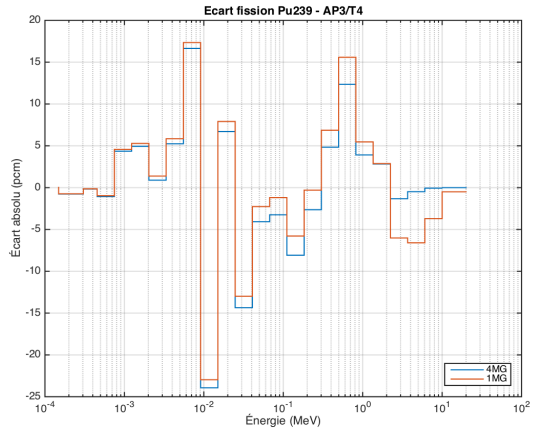
(a) Configuration standard



(b) Dilution \*0.5



(c) Dilution \*0.1



(d) Dilution \*0.01

Figure 3.7 Évolution du taux de fission du Pu239 en vidange

L'écart sur le taux de fission du Pu239 varie très peu avec la vidange (voir figure 3.7). Pour conclure sur l'étude de l'effet de vidange (sans modèle de fuites), on peut dire que les résultats obtenus pour les différentes dilutions sont très satisfaisants et ne masquent pas les compensations.

### 3.4 Comparaison 1968g ECCO / 1200g AEMC RNR

#### 3.4.1 Étude macroscopique

Pour compléter notre travail sur la cellule, il a été décidé à la fin du stage de travailler sur l'impact du choix du maillage énergétique. En effet, Pietro Mosca, lors de sa thèse au CEA Saclay (Mosca (2009)) a travaillé au développement d'un outil automatisé de définition de maillages énergétiques adaptés à chaque type de réacteur basé sur une méthode de minimisation des écarts de taux de réaction avec un maillage de référence hyperfin. Le maillage 1200 groupes AEMC-RNR est plus raffiné que le maillage 1968g ECCO autour du keV et plus grossier dans les hautes et très basses énergies.

On utilise les bibliothèques de sections efficaces et les tables de probabilité à 1200 groupes fournies par le SERMA afin de comparer ces résultats avec ceux du maillage 1968g. Par ailleurs, on compare ces résultats APOLLO3 au calcul de référence TRIPOLI4. Tous ces calculs ont été effectués en utilisant les données nucléaires issues de l'évaluation JEFF3.1.1.

Tableau 3.6 Comparaison des  $k_{eff}$  pour les maillages énergétiques 1968g ECCO et 1200g AEMC RNR

|               | $k_{eff}$                   | $\Delta\rho$ | $\Delta F_{Pu239}$ | $\Delta C_{U238}$ |
|---------------|-----------------------------|--------------|--------------------|-------------------|
| TRIPOLI4      | $1,55807 \pm 2 \text{ pcm}$ |              |                    |                   |
| APOLLO3-1986g | 1,55839                     | 13           | 14                 | -28               |
| APOLLO3-1200g | 1,55827                     | 8            | 5                  | -12               |

Dans le tableau (et tout le reste de l'étude),  $\Delta F_x$  et  $\Delta C_x$  correspondent à l'écart absolu cumulé (en pcm) entre APOLLO3 et TRIPOLI4 pour le taux de fission et le taux de capture.  $x$  correspond à l'isotope considéré. L'écart cumulé considéré correspond à la somme des écarts absolus pour les 24 premiers groupes.

### 3.4.2 Étude du flux dans le combustible et des taux de réaction isotopiques

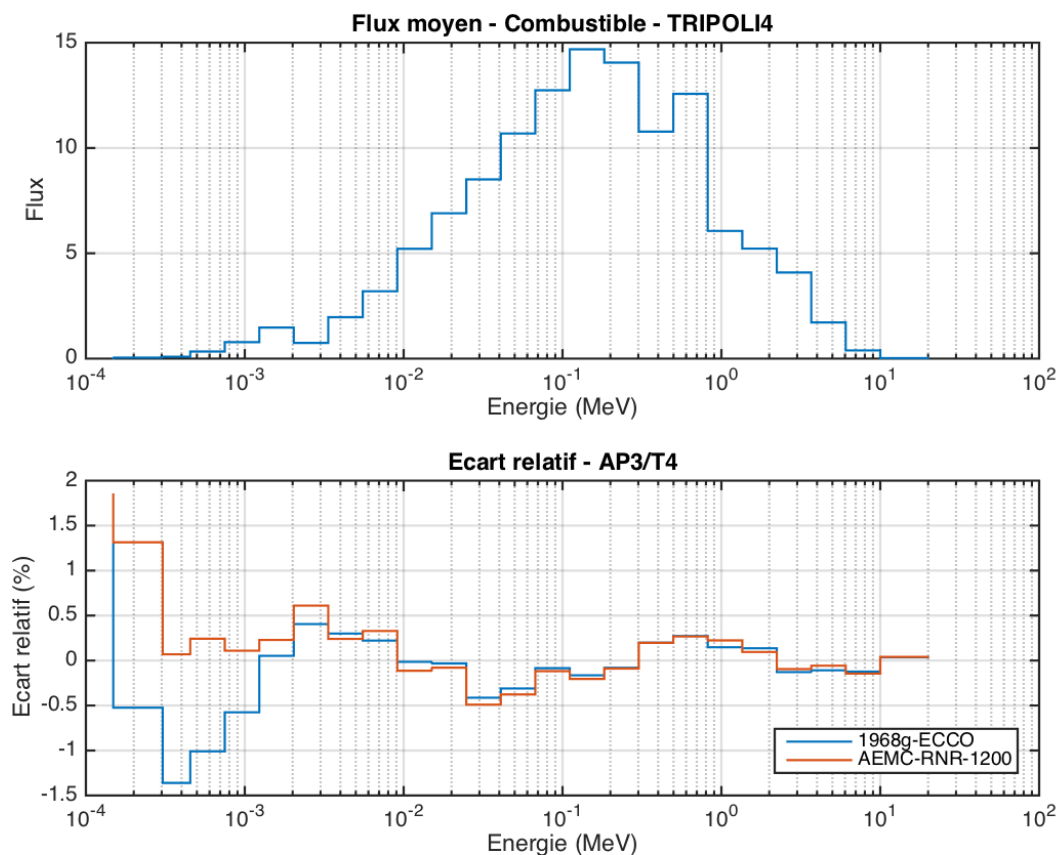


Figure 3.8 Flux moyen dans le combustible

On observe que l'utilisation du maillage 1200 groupes AEMC RNR permet, grâce à son raffinement adapté aux RNR, de diminuer l'écart relatif sur le flux moyen dans le combustible uniquement au-dessous de 2 keV, c'est-à-dire là où le flux n'est plus très élevé (pas de gros impact sur les taux de réaction, cf Figure 3.9).

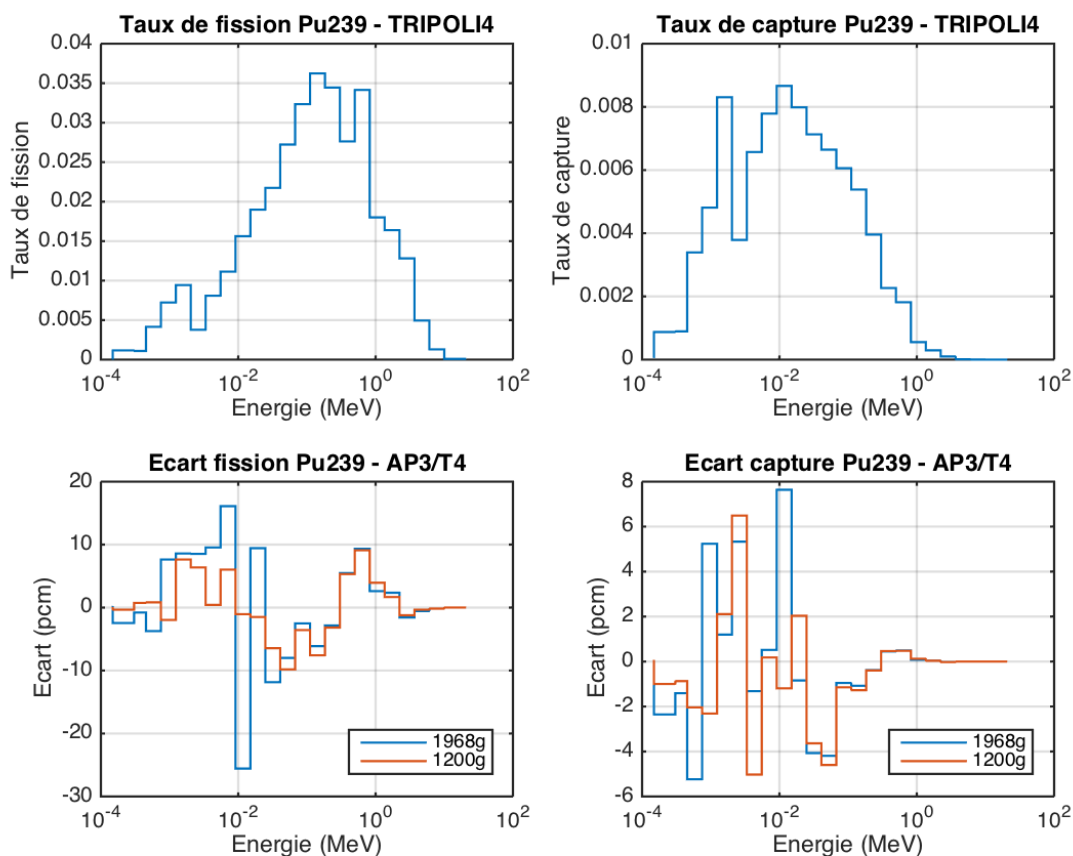


Figure 3.9 Taux de fission et de capture du Pu239

Concernant le Pu239, on observe très clairement l'impact du maillage à 1200 groupes. En effet, l'écart absolu entre APOLLO3 et TRIPOLI4 se réduit significativement autour de 10 keV, ce qui est confirmé par l'écart cumulé présenté dans le tableau 3.6. Il faut surtout souligner le fait que le maillage à 1200 groupes permet de réduire les compensations d'écart absolu entre les groupes d'énergie (autour de 10 keV) sur le taux de fission Pu239.

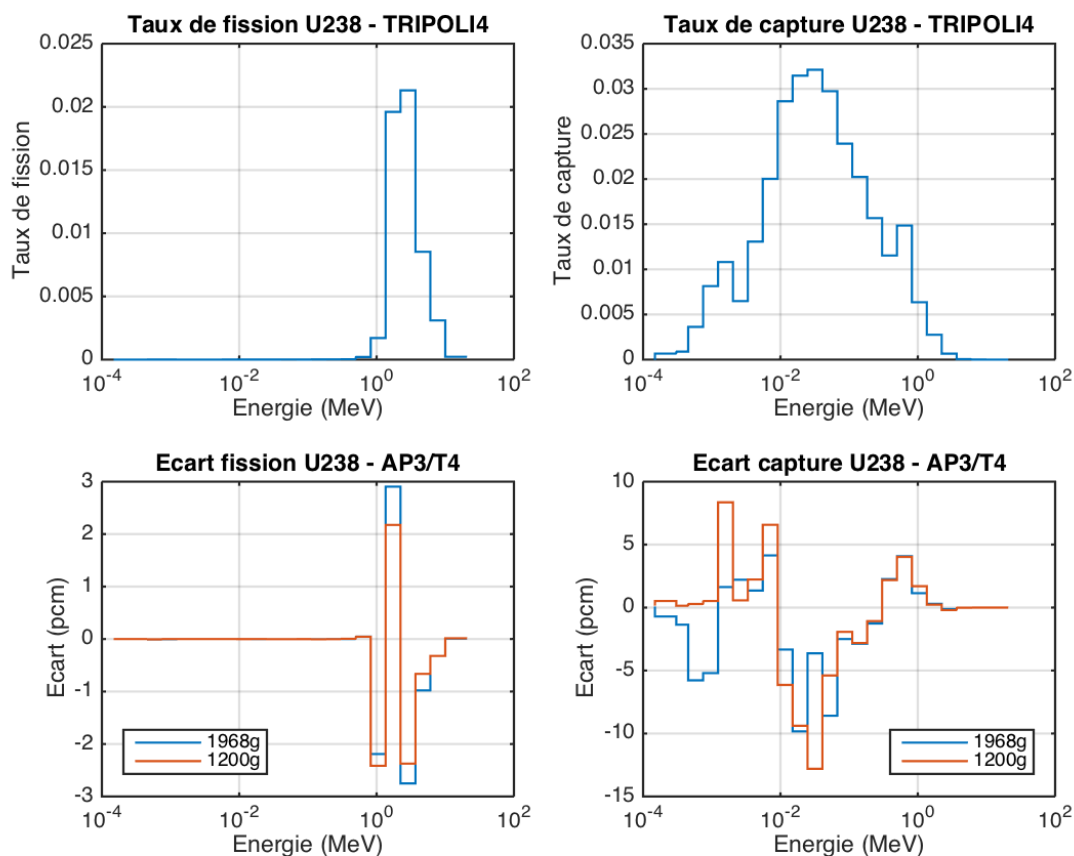


Figure 3.10 Taux de fission et de capture de l'U238

Pour l'U238, l'erreur sur le taux de capture est réduite dans le domaine des basses énergies mais il faut relativiser cela par les variations d'écart absolu qui restent importantes autour de 10 keV. La seule conclusion définitive que l'on puisse faire sur ce maillage, c'est qu'il permet effectivement d'améliorer le traitement de la fission du Pu239.

### 3.5 Comparaison entre JEFF3.1.1 et JEFF3.2 pour le Pu239

#### 3.5.1 Travail effectué dans JEFF3.2 sur le Pu239

Le traitement de la fission du Pu239 dans JEFF3.2 est basé sur une nouvelle analyse conjointe du CEA avec ORNL<sup>1</sup> dans le domaine des résonances résolues (nouveaux paramètres de résonance) et dans le continuum en collaboration avec NRG<sup>2</sup>.

Dans le domaine des résonances non-résolues, on utilise les mêmes données que dans JEFF3.1.1. La seule différence entre JEFF3.1.1 et JEFF3.2 concerne le paramètre de reconstruction des sections efficaces (LSSF) qui passe de 0 dans JEFF3.1.1 à 1 dans JEFF3.2 (Noguere *et al.* (2011)). Ce paramètre fixe la façon dont les données de l'évaluation ENDF provenant des File 2 et File 3 sont combinées. Le traitement effectué par CALENDF change donc.

Selon Noguere *et al.* (2011), une comparaison (avec et sans TP) a été effectuée entre TRI-POLI4 (utilisant CALENDF pour les TP) et MCNP<sup>3</sup> (utilisant PURR pour les TP<sup>4</sup>) à partir de JEFF3.2 avec de bons résultats. Par contre, la même comparaison avait été effectuée avec TP à partir de JEFF3.1.1, l'écart était de l'ordre de 200 pcm (Noguere *et al.* (2011)).

#### 3.5.2 Étude macroscopique

Nous effectuons ici une comparaison spécifique à l'isotope Pu239 entre JEFF3.1.1 et JEFF3.2, c'est-à-dire que les calculs APOLLO3 seront faits avec une bibliothèque basée sur l'évaluation JEFF3.1.1 pour les isotopes autres que le Pu239 et avec des bibliothèques JEFF3.2 et JEFF3.1.1 pour le Pu239. Bien entendu, on doit faire la même chose avec TRIPOLI4 afin de comparer des sections efficaces qui sont cohérentes entre elles (même évaluation).

Tableau 3.7 Comparaison des  $k_{eff}$  pour les deux évaluations JEFF3.1.1 et JEFF3.2

|           | TRIPOLI4               | $\Delta\rho$ T4 | APOLLO3 | $\Delta\rho$ AP3/T4 | $\Delta F_{Pu239}$ | $\Delta C_{U238}$ |
|-----------|------------------------|-----------------|---------|---------------------|--------------------|-------------------|
| JEFF3.1.1 | $1,55803 \pm 1.8$ pcm  |                 | 1,55839 | 15                  | 14                 | -28               |
| JEFF3.2   | $1,556297 \pm 2.8$ pcm | -71             | 1,55657 | 11                  | 6                  | -25               |

1. ORNL : Oak Ridge National Laboratory situé aux États-Unis

2. NRG : Nuclear Research and Consultancy Group basé aux Pays-Bas

3. MCNP : Code Monte-Carlo développé au Los Alamos National Laboratory

4. PURR : Module de NJOY qui calcule les TP dans le domaine non-résolu pour MCNPMacFarlane *et al.* (2015)



### 3.5.3 Étude du flux dans le combustible et des taux de réaction isotopiques

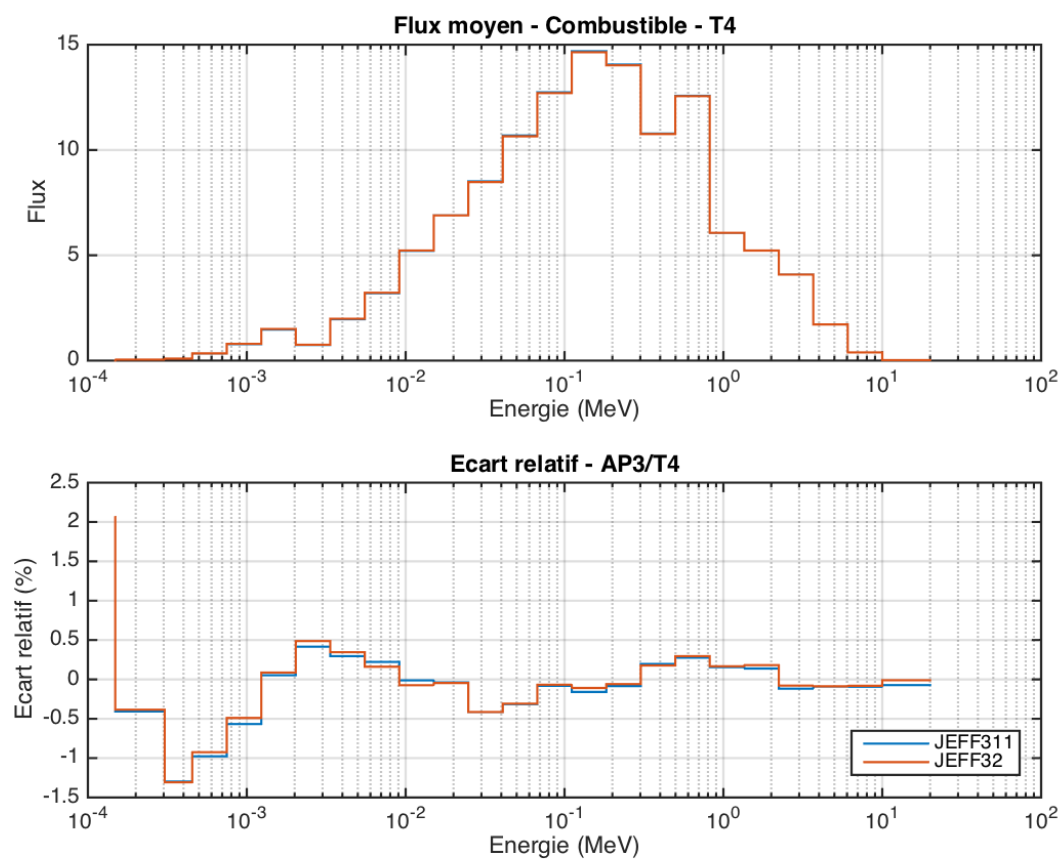


Figure 3.11 Flux moyen dans le combustible

Le choix de l'évaluation n'impacte pas l'erreur sur le flux moyen dans le combustible (voir figure 3.11). En effet, c'est au niveau des taux de réaction que la différence devrait apparaître.

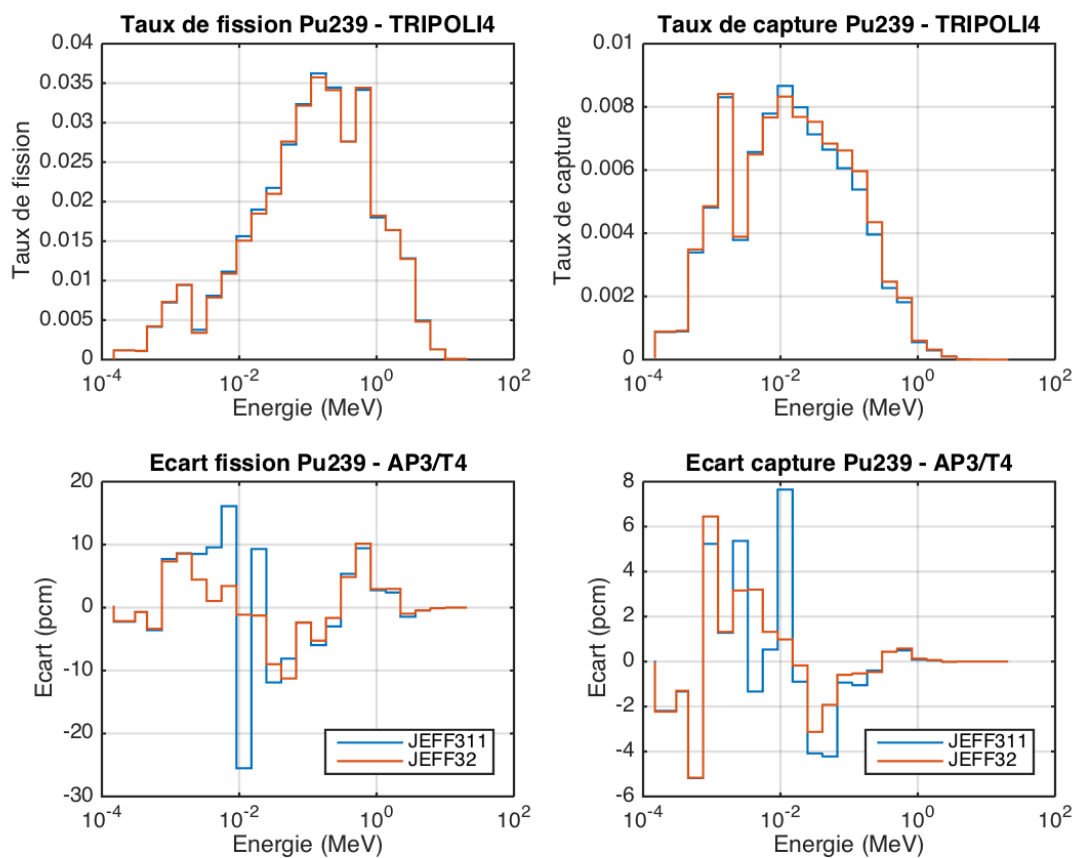


Figure 3.12 Taux de fission et de capture du Pu239

Comme on peut l'observer sur la figure 3.12 ainsi que dans le tableau 3.7, l'évaluation JEFF3.2 permet de diminuer fortement l'erreur cumulé sur le taux de fission Pu239 et de réduire les variations d'écart absolus entre les différentes groupes (autour de 10 keV notamment).

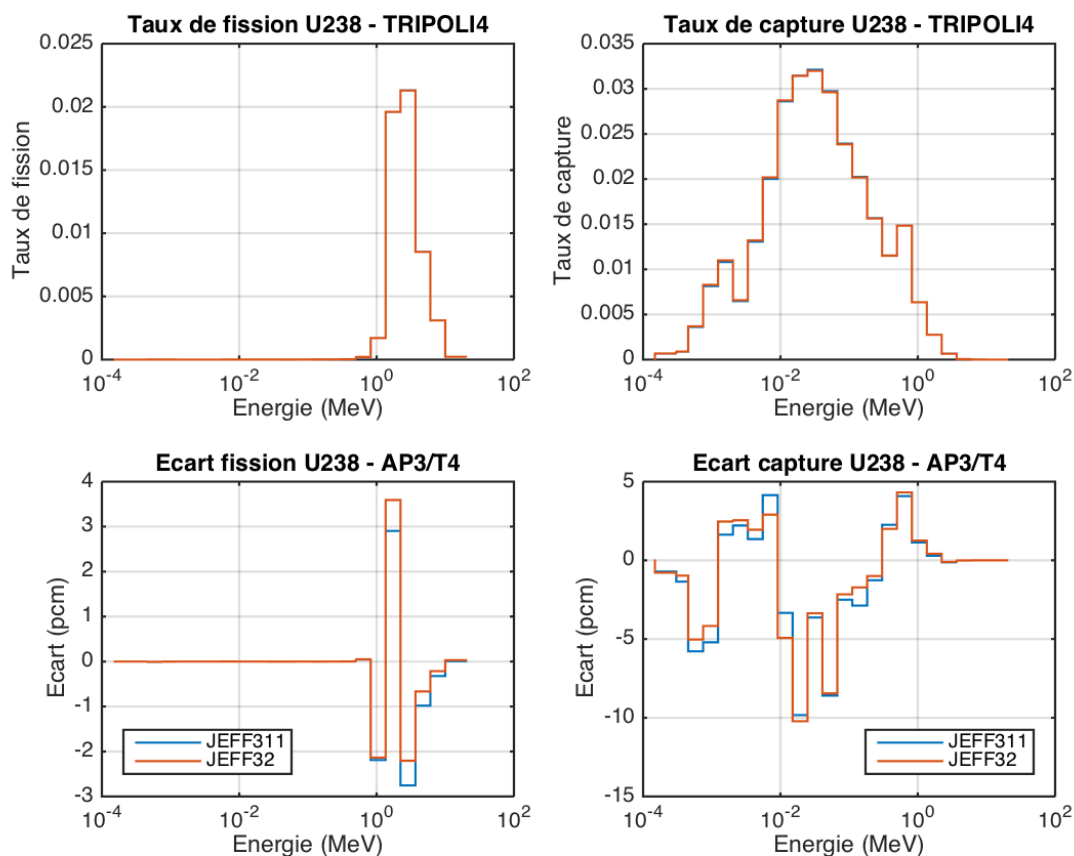


Figure 3.13 Taux de fission et de capture de l'U238

Par ailleurs, le choix de l'évaluation ne modifie pas (ou très peu) l'écart sur le taux de capture U238, on pouvait s'y attendre puisque l'U238 n'a pas changé. Les résultats obtenus pour cette étude permettent de confirmer la qualité du travail qui a été mené sur l'évaluation du Pu239 dans JEFF3.2 ainsi que son intérêt pour les calculs réseau RNR. Nous avons fait le tour des sujets importants à traiter en ce qui concerne la configuration cellule, nous pouvons donc passer à l'étude des assemblages.

## CHAPITRE 4 Assemblages divers à burnup nul

### 4.1 Premiers résultats de l'assemblage fissile

#### 4.1.1 Configuration géométrique de l'assemblage fissile

La figure 4.1 représente schématiquement le passage de la cellule à l'assemblage dans un schéma réseau. Dans le calcul réseau standard, le calcul d'assemblage fissile est le premier à être effectué. Ici, on s'intéresse à un assemblage fissile de type RNR. Les calculs cellule sont destinés en général au développement et la validation d'un code de calcul, contrairement aux calculs assemblage qui constituent la première étape dans un calcul de coeur.

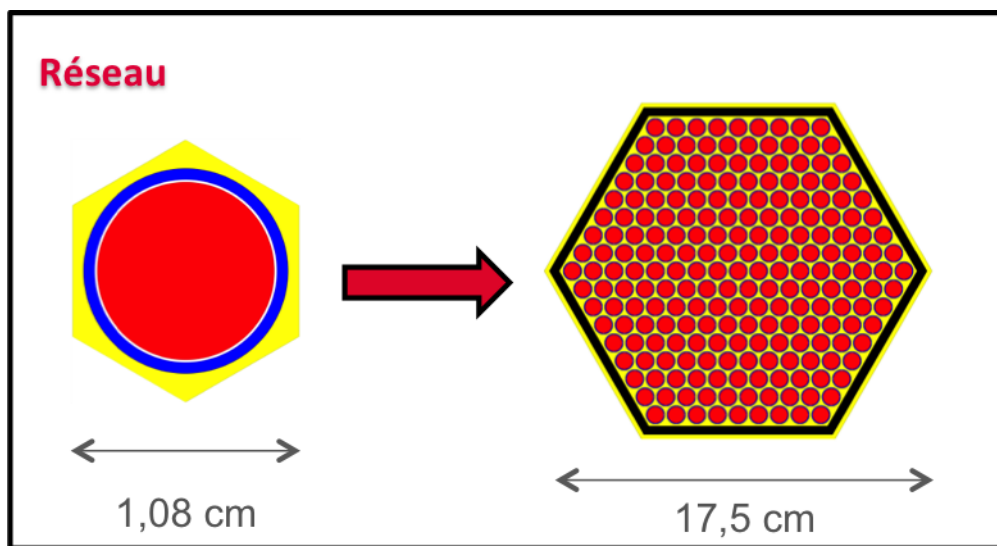


Figure 4.1 Passage de la cellule à l'assemblage

Ce dernier contient 217 aiguilles correspondant à la cellule étudiée dans le premier chapitre. Cet ensemble d'aiguilles baigne dans le caloporteur sodium et est enfermé dans un boîtier acier. Les dimensions et la composition exactes de l'assemblage ne seront pas indiquées pour des raisons de confidentialité.

#### 4.1.2 Maillage de calcul et premiers résultats

On utilise pour le calcul d'assemblage fissile un maillage de calcul correspondant au douzième d'assemblage. On distingue deux zones d'autoprotection : la couronne externe (la plus près du boîtier) et les couronnes internes. La raison de ce choix est de distinguer les aiguilles qui sont en contact avec d'autres aiguilles (homogénéité) des aiguilles qui sont en contact avec un autre type de matériau complètement différent (forte hétérogénéité liée à la présence du boîtier et des poches de caloporteur interne). Le zonage utilisé est représenté dans la figure 4.2. On distingue 3 zones : deux correspondant aux zones d'autoprotection, la troisième (zone 0) correspond à l'aiguille située au sommet du boîtier.

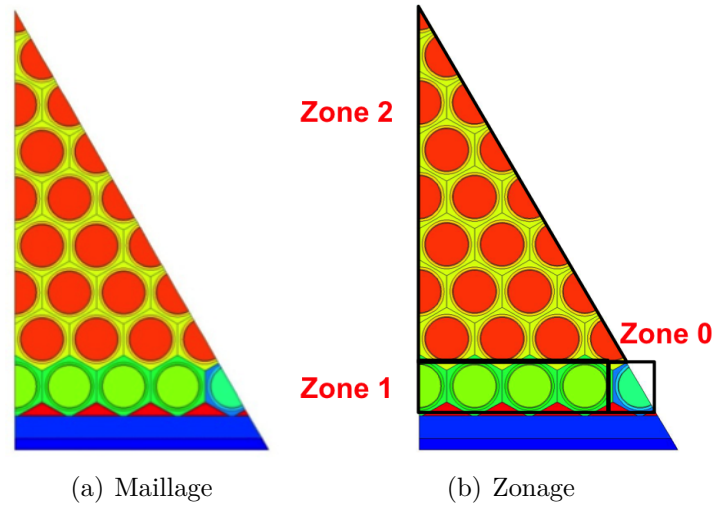


Figure 4.2 Maillage de calcul et zonage correspondant

Tableau 4.1 Résultats préliminaires de l'assemblage fissile

| CALCUL     | $k_{eff}$           | $\Delta\rho$ (AP3/T4) |
|------------|---------------------|-----------------------|
| TRIPOLI4   | $1,49712 \pm 3$ pcm |                       |
| APOLLO3 P0 | 1,49913             | 89                    |
| APOLLO3 P1 | 1,49884             | 76                    |
| APOLLO3 P3 | 1,49894             | 80                    |

On observe tout d'abord que l'anisotropie (l'ordre d'anisotropie du choc pris en compte) n'a pas d'effet marqué au niveau de l'écart en réactivité entre APOLLO3 et TRIPOLI4. Au premier abord, le P1 semble être l'option standard à privilégier. Par ailleurs, en ce qui concerne les écarts en réactivité, on constate que la surestimation du  $k_{eff}$  par APOLLO3 est plus importante que dans le cas de la cellule. Nous allons essayer de trouver la raison de cette surestimation supplémentaire.

### 4.1.3 Étude de la fission du Pu239 et de la capture de l'U238

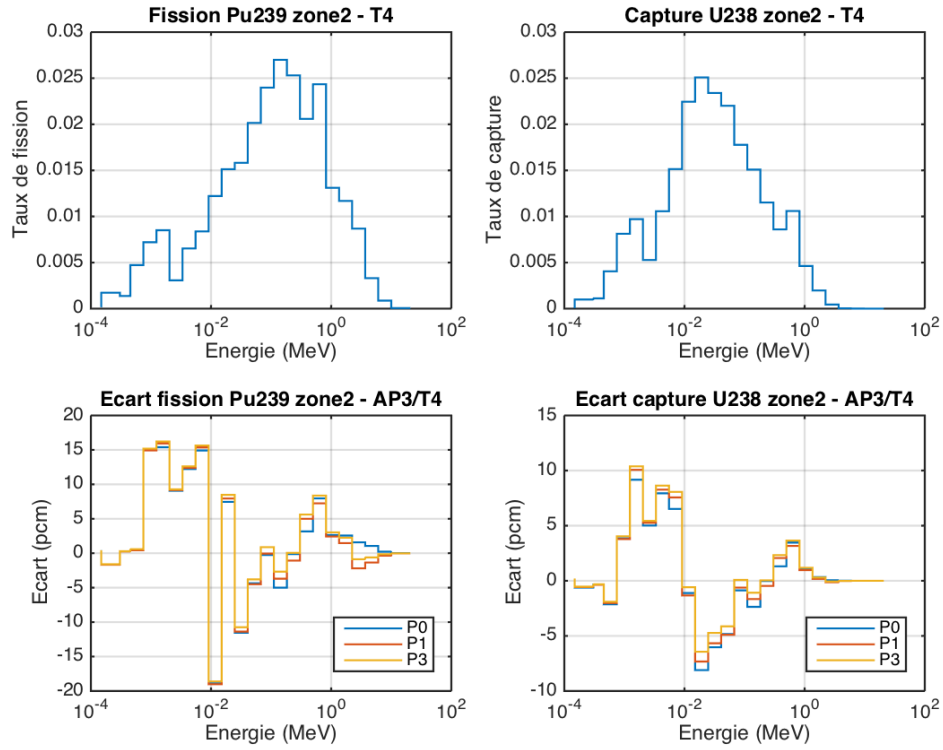


Figure 4.3 Fission du Pu239 et capture de l'U238 dans la zone 2

Tableau 4.2 Écarts cumulés sur le Pu239 et l'U238

| CALCUL     | $\Delta\rho$ (AP3/T4) | $\Delta F_{Pu239}$ | $\Delta C_{U238}$ | $\Delta C_{Pu239}$ | $\Delta F_{U238}$ |
|------------|-----------------------|--------------------|-------------------|--------------------|-------------------|
| APOLLO3 P0 | 89                    | 52                 | -1                | 19                 | 2                 |
| APOLLO3 P1 | 76                    | 52                 | 4                 | 21                 | -5                |
| APOLLO3 P3 | 80                    | 65                 | 13                | 24                 | -1                |

Pour rester concis, on ne représente ici que la fission du Pu239 et la capture de l'U238 dans la zone 2 (la plus grande donc la plus représentative), néanmoins, les courbes correspondant aux autres zones seront placées en annexe. Sur la figure 4.3, on observe toujours l'écart de 15 pcm autour de 10 keV comme dans le cas cellule. Néanmoins, l'écart cumulé sur la fission du Pu239 (tableau 4.2) est ici beaucoup plus important que dans le cas cellule (52 pcm contre 15 dans le cas cellule). Il y a une plus grande surestimation de la fission au-dessous de 10 keV. En ce qui concerne la capture de l'U238, on observe toujours le même type de compensations avec des écarts cumulés relativement faibles.

#### 4.1.4 Diffusion du Fe56 et flux dans le tube

Le nouvel élément introduit dans l'assemblage fissile est le tube. L'isotope le plus important dans la composition du tube acier est le Fe56. On s'intéresse alors à la diffusion de ce dernier dans le tube pour voir comment le code APOLLO3 traite cette diffusion (élastique et inélastique). On complétera cela par l'étude du flux dans le tube afin d'avoir une vue d'ensemble sur le problème.

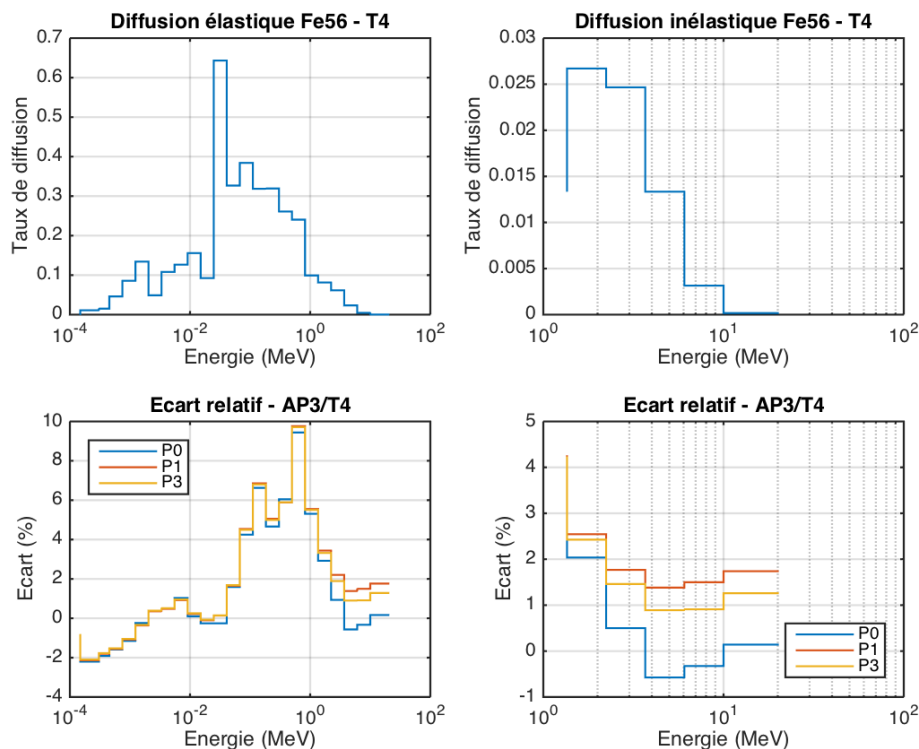


Figure 4.4 Diffusion élastique et inélastique du Fe56 dans le tube

En ce qui concerne la diffusion élastique du Fe56 (la plus importante), on remarque l'écart relatif entre APOLLO3 et TRIPOLI4 est supérieur à 5% dans le domaine énergétique 100 keV - 1 MeV. La diffusion inélastique, de son côté, est très faible en ordre de grandeur, par conséquent les écarts relatifs sont peu significatifs. On se propose alors de représenter le flux moyen dans le tube afin d'identifier l'origine du problème (autoprotection ou flux).

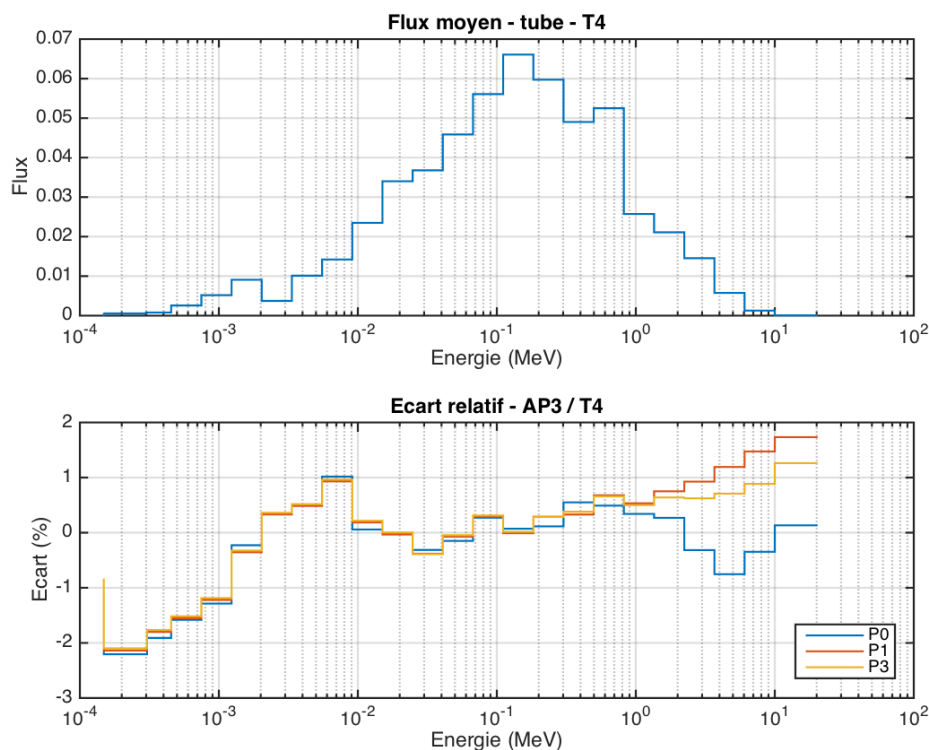


Figure 4.5 Flux moyen dans le tube

Sur la figure 4.5, on remarque que l'écart relatif sur le flux moyen ne dépasse pas 1% dans les groupes où le flux y est significatif (voir la courbe du haut). Le flux est donc "correctement" calculé dans le tube cependant le taux de diffusion élastique du Fe56 est largement surestimé. Il y a donc surestimation de la section de diffusion élastique autoprotégée du Fe56 dans le tube acier. On peut se demander si cela est un problème de mélange (effets d'autoprotection mutuelle entre les différents isotopes du fer). La prochaine configuration étudiée (dans la section suivante) sera donc un assemblage avec un boîtier (tube) composé uniquement de Fe56.



#### 4.1.5 Étude du flux dans le combustible

Pour conclure sur cette configuration standard de l'assemblage fissile, on s'intéresse au flux dans le combustible (en particulier dans la zone 2), afin d'éliminer le calcul du flux comme cause probable de l'écart sur le taux de fission du Pu239.

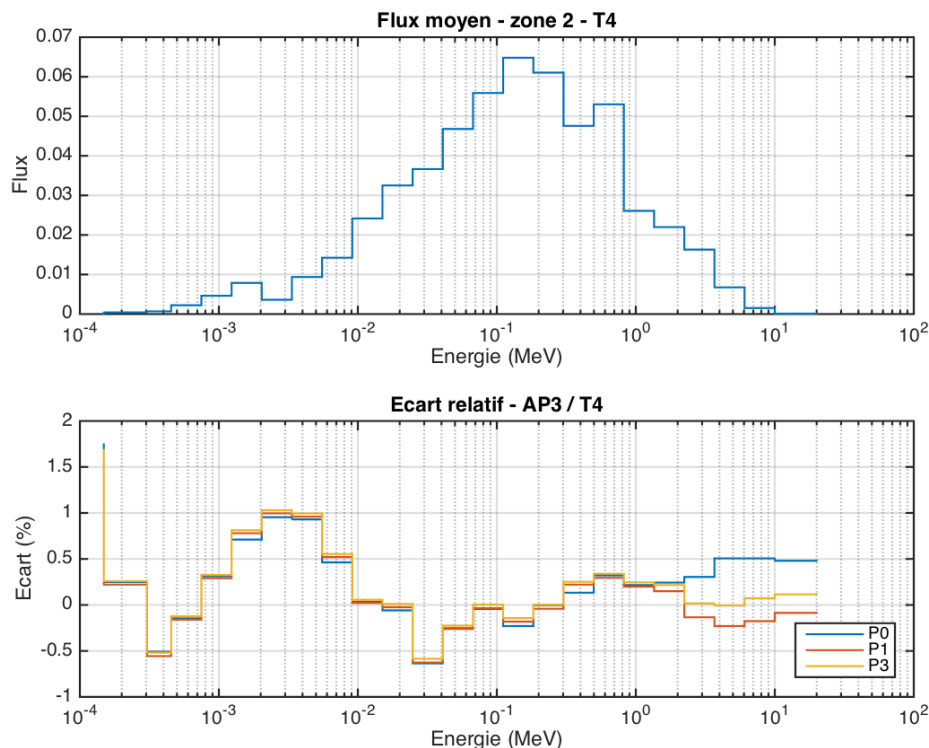


Figure 4.6 Flux moyen dans la zone 2

La figure 4.5 ne présente pas d'écarts importants ( $<0.5\%$ ) dans les groupes significatifs). On retrouve même ce qui avait été obtenu dans la cellule pour le flux à haute énergie (autour de 1 MeV) : variation importante selon l'anisotropie prise en compte. Le calcul du flux n'est donc pas la cause de l'écart sur le taux de fission du Pu239.

## 4.2 Assemblage fissile avec boîtier Fe56

### 4.2.1 Évolution du taux de diffusion

La composition du boîtier (appelée EM10) est ainsi remplacée par du Fe56 (on a additionné les concentrations des isotopes du Fe présents dans la composition EM10 pour créer une nouvelle concentration en Fe56, dans le but de garder des valeurs très proches). On obtient les résultats préliminaires suivants :

Tableau 4.3 Écarts cumulés sur le Pu239 et l'U238

| CALCUL     | $\Delta\rho$ (AP3/T4) | $\Delta F_{Pu239}$ | $\Delta C_{U238}$ | $\Delta C_{Pu239}$ | $\Delta F_{U238}$ |
|------------|-----------------------|--------------------|-------------------|--------------------|-------------------|
| APOLLO3 P0 | 92                    | 54                 | 5                 | 12                 | 2                 |
| APOLLO3 P1 | 83                    | 55                 | 9                 | 13                 | -4                |
| APOLLO3 P3 | 85                    | 54                 | 8                 | 13                 | -2                |

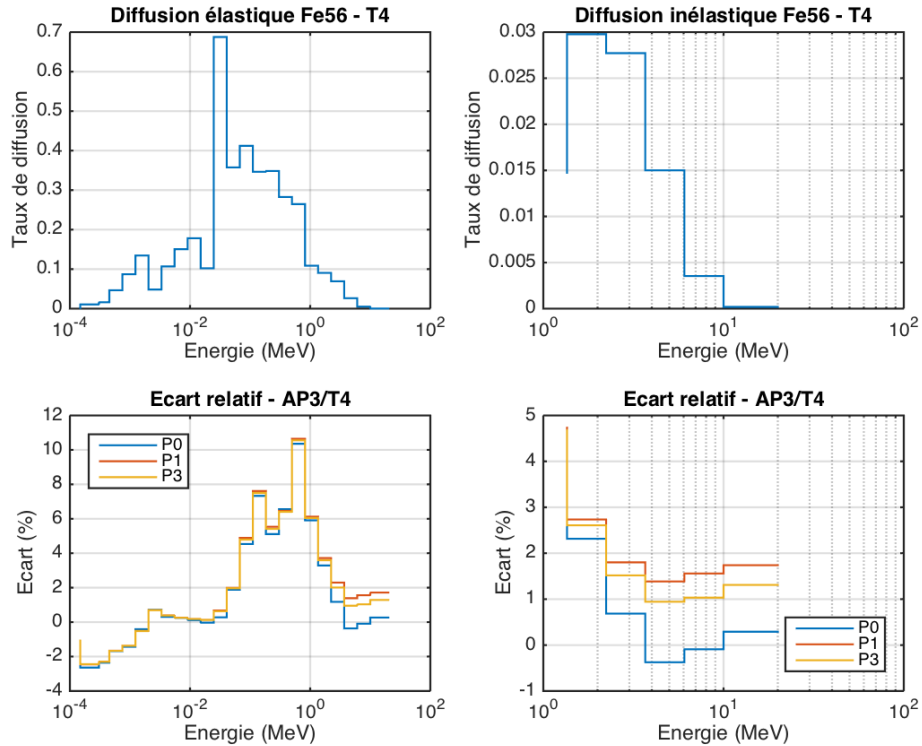


Figure 4.7 Diffusion élastique et inélastique du Fe56 dans le boîtier

Le problème sur la diffusion élastique du Fe56 subsiste : le problème vient donc du Fe56 et n'est pas lié au mélange EM10.

### 4.2.2 Évolution du flux dans le tube

On représente à nouveau le flux moyen dans le tube.

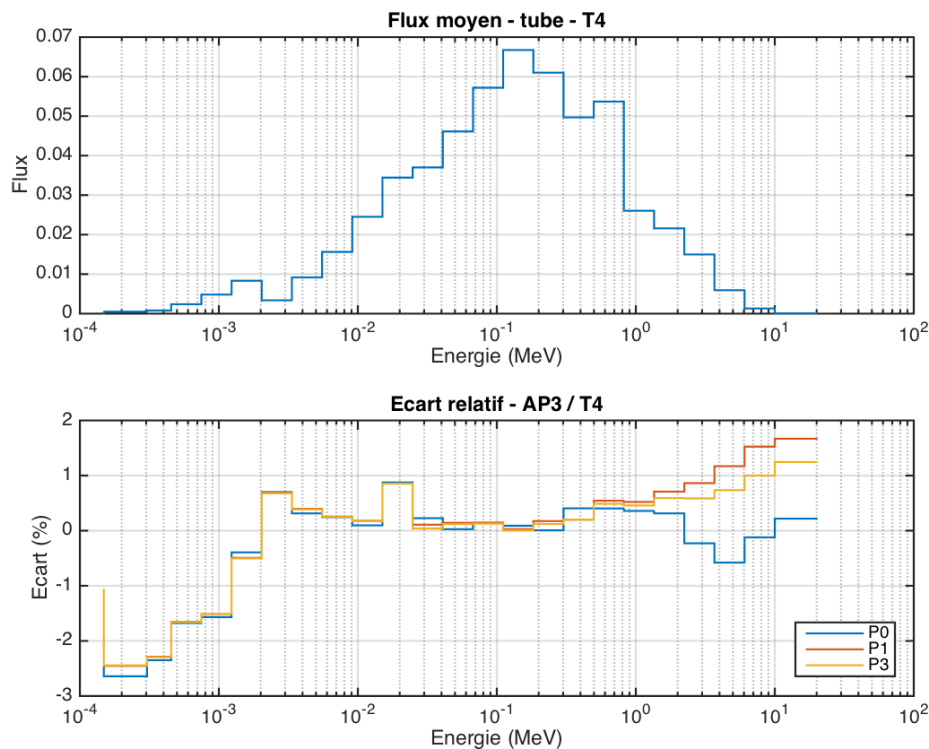


Figure 4.8 Flux moyen dans le tube

Le flux moyen dans le tube se comporte toujours de la même manière avec des écarts relatifs faibles ( $<0.5\%$  dans les groupes significatifs). Le problème vient bien de la diffusion du Fe56. Pour creuser un peu le sujet, nous allons passer à une nouvelle configuration : on va remplacer le Fe56 du boîtier par du Na23 pour voir si les écarts diminuent de façon importante. Cela nous permettra de confirmer les principaux problèmes du calcul de l'assemblage fissile : fission du Pu239 et diffusion du Fe56.

### 4.3 Assemblage fissile avec boîtier Na23

#### 4.3.1 Configuration étudiée et résultats préliminaires

On remplace donc l'EM10 par du Na23. Le but est double : voir si les écarts en réactivité subsistent en remplaçant le fer par du sodium et donc confirmer ou non que le principal problème de l'assemblage fissile reste le traitement de la fission du Pu239. Dans le tableau 4.4, on présente les différents résultats préliminaires obtenus pour cette configuration (Na23) tout en indiquant les résultats pour l'assemblage fissile standard (EM10) à fin de comparaison.  $\Delta\rho$  correspond à l'écart entre APOLLO3 et TRIPOLI4.

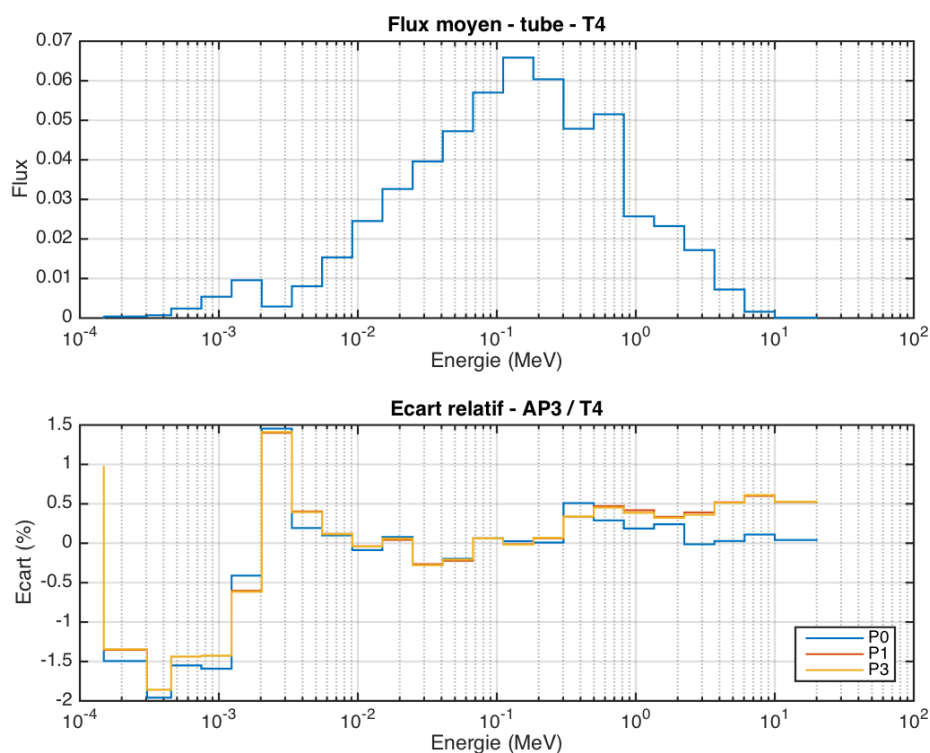


Figure 4.9 Flux moyen dans le tube

Tableau 4.4 Résultats préliminaires sur la configuration Na23 et comparaison avec la configuration standard EM10

| CALCUL     | $k_{eff}$ (EM10) | $k_{eff}$ (Na23) | $\Delta\rho$ (EM10) | $\Delta\rho$ (Na23) |
|------------|------------------|------------------|---------------------|---------------------|
| TRIPOLI4   | $1,49713 \pm$    | $1,52769 \pm$    |                     |                     |
| APOLLO3 P0 | 1,49913          | 1,5297           | 89                  | 86                  |
| APOLLO3 P1 | 1,49884          | 1,52964          | 76                  | 83                  |
| APOLLO3 P3 | 1,49893          | 1,52694          | 80                  | 83                  |

#### 4.3.2 Diffusion du Na23 dans le tube et écarts cumulés sur la configuration Na23

On représente ici la diffusion du Na23 dans le tube à fin de comparaison avec le Fe56. Par ailleurs, on calcule les écarts cumulés pour la fission et la capture du Pu239 et de l'U238 afin de comparer la configuration Na23 avec la configuration standard EM10.

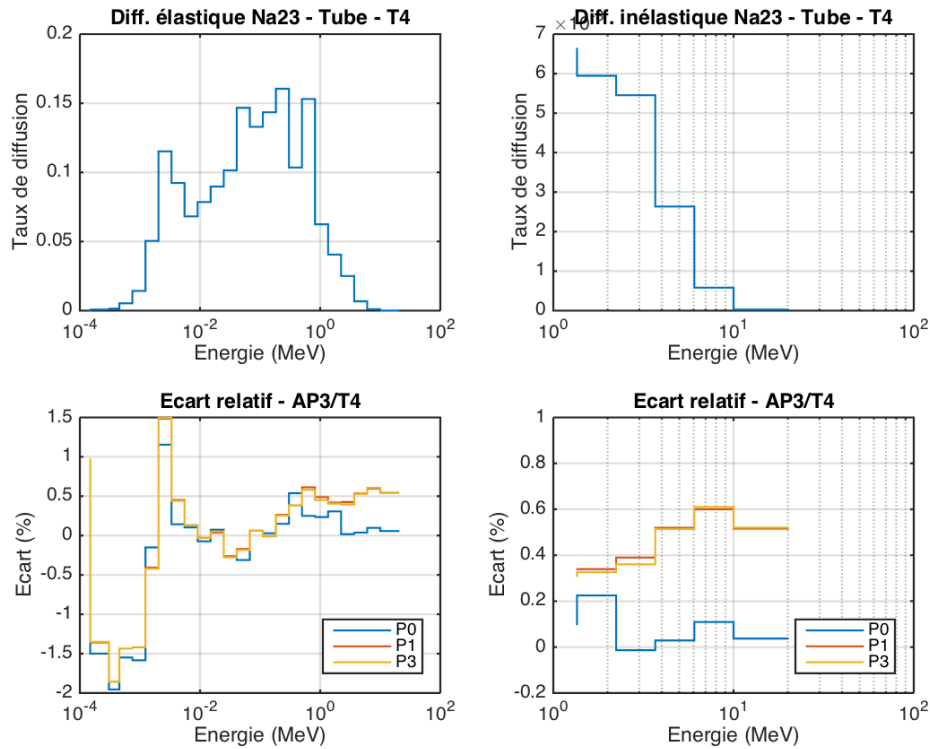


Figure 4.10 Diffusion élastique et inélastique du Na23 dans le boîtier

Sur la figure 4.10, on observe que les écarts observés précédemment sur la diffusion élastique du Fe56 (figure 4.7) ne sont pas présents ici. Par ailleurs, on voit que l'écart cumulé sur la fission du Pu239 indiqué dans le tableau 4.5 est toujours du même ordre de grandeur. Cela

Tableau 4.5 Écarts cumulés sur le Pu239 et l'U238 dans la configuration Na23

| APOLLO3 | $\Delta\rho$ (AP3/T4) | $\Delta F_{Pu239}$ | $\Delta C_{U238}$ | $\Delta C_{Pu239}$ | $\Delta F_{U238}$ |
|---------|-----------------------|--------------------|-------------------|--------------------|-------------------|
| P0      | 86                    | 55                 | 2                 | 13                 | 0                 |
| P1      | 83                    | 54                 | 3                 | 14                 | -1                |
| P3      | 83                    | 54                 | 3                 | 14                 | -1                |

nous amène à la conclusion suivante sur l'assemblage fissile :

- La fission du Pu239 présente un biais plus significatif que dans le cas cellule pour des énergies inférieures à 10 keV.
- Utiliser JEFF3.2 est peut-être la solution à ce problème (comme on a pu le voir avec la cellule). Cette comparaison importante n'a pas été faite pour l'assemblage par manque de temps. En effet, la bibliothèque JEFF3.2 du Pu239 pour TRIPOLI4 n'a été disponible qu'à la toute fin de mon stage. Nous n'avons pu traiter que le motif cellule.
- Les écarts sur la diffusion du Fe56 sont peu significatifs. En effet, les écarts pour la réactivité et les taux de réaction des noyaux lourds sont comparables à ceux obtenus avec un boîtier "sodium".

#### 4.4 Cluster B4C - fissile

Après avoir étudié l'assemblage fissile, nous allons maintenant aller plus loin en nous intéressant à un barreau d'absorbant B4C environné par du combustible fissile. On appelle ce motif "cluster B4C".

##### 4.4.1 Présentation des maillages de calcul

On utilise une géométrie de calcul qui correspond au 1/12ème de la géométrie totale. Cette dernière est composée d'un ensemble de barreaux absorbants B4C lui-même entouré de 6 assemblages fissiles hexagonaux dans un réseau.

Les maillages sont présentés dans la figure 4.11.

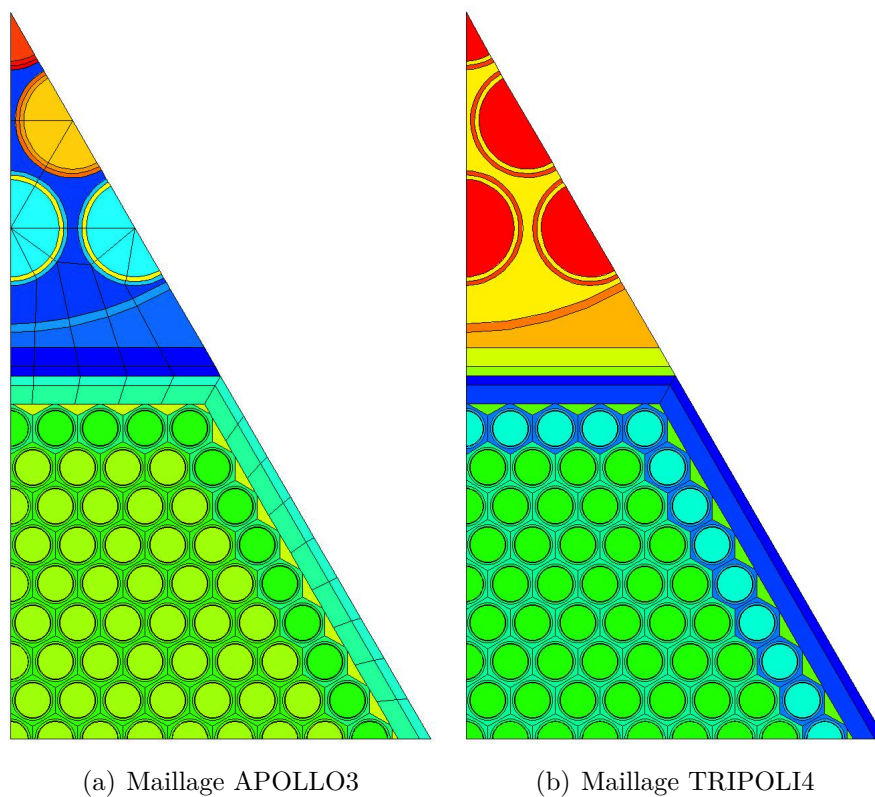


Figure 4.11 Maillages de calcul APOLLO3 et TRIPOLI4 pour la configuration cluster B4C

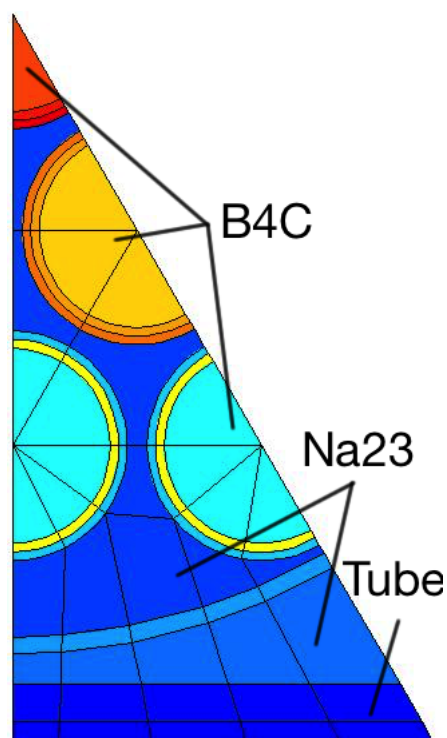


Figure 4.12 Représentation 1/12 du réseau hexagonal B4C

La partie supérieure correspond au réseau hexagonal de barreaux B4C gainés placés dans du sodium. Cet ensemble est lui-même placé dans un tube acier (voir figure 4.12). On nomme B4C-C3 (rouge), B4C-C2 (orange), et B4C-C1 (cyan) les différentes couronnes de barres B4C. La partie inférieure correspond à l'assemblage fissile (couronne externe (C1) et ensemble des couronnes internes (C2)) délimité par un tube acier également. Le maillage APOLLO3 est plus raffiné, notamment au niveau des barres de B4C et du caloporteur placé entre le tube et les barreaux de B4C afin d'éviter d'avoir des régions trop grandes vis à vis des gradients de flux.



#### 4.4.2 Cohérence des résultats Assemblage fissile - Cluster B4C

On cherche ici à savoir si les résultats obtenus avec APOLLO3 pour le cluster B4C sont cohérents avec l'assemblage fissile standard.

Tableau 4.6  $k_{eff}$  - Cluster et Assemblage

| Calcul     | $k_{eff}(\text{CLUSTER})$   | $k_{eff}(\text{ASSEMBLAGE})$ |
|------------|-----------------------------|------------------------------|
| TRIPOLI4   | $1,06197 \pm 2 \text{ pcm}$ | $1,49713 \pm 2 \text{ pcm}$  |
| APOLLO3 P0 | 1,07099                     | 1,49913                      |
| APOLLO3 P1 | 1,06092                     | 1,49884                      |
| APOLLO3 P3 | 1,06223                     | 1,49893                      |

Tableau 4.7 Écarts en réactivité - Cluster et Assemblage

| Calcul     | $\Delta\rho(\text{CLUSTER})$ | $\Delta\rho(\text{ASSEMBLAGE})$ | $\Delta(\Delta\rho)$ |
|------------|------------------------------|---------------------------------|----------------------|
| APOLLO3 P0 | 793                          | 89                              | 704                  |
| APOLLO3 P1 | -93                          | 76                              | -169                 |
| APOLLO3 P3 | 23                           | 80                              | -57                  |

On observe dans le tableau 4.7 que l'écart en réactivité entre APOLLO3 et TRIPOLI4 évolue de manière très importante selon le degré d'anisotropie dans le cas du cluster. Dans le cas de l'assemblage fissile, l'écart en réactivité est presque constant. On peut donc supposer que la différence vient du traitement de l'anisotropie des chocs dans la structure qui différencie les deux géométries c'est-à-dire les barreaux de B4C. Si on se concentre sur la dernière colonne du tableau 4.7, on voit que la différence des écarts en réactivité cluster - assemblage diminue fortement en passant du P0 au P3 (on passe de 704 pcm à -57 pcm). Cela signifie que le traitement de la configuration Cluster converge vers celui de l'assemblage fissile (en terme d'écart avec TRIPOLI4). La nécessité d'utiliser le P3 pour traiter le cluster B4C est donc réelle.

#### 4.4.3 Absorption du B4C

On représente ici le taux d'absorption dans le B4C-C1, qui correspond à la plus grande maille de B4C. Le calcul APOLLO3 a été passé en P0, P1 et P3. On fait également un bilan cumulé de l'erreur sur le taux d'absorption B4C (dans toute la configuration).

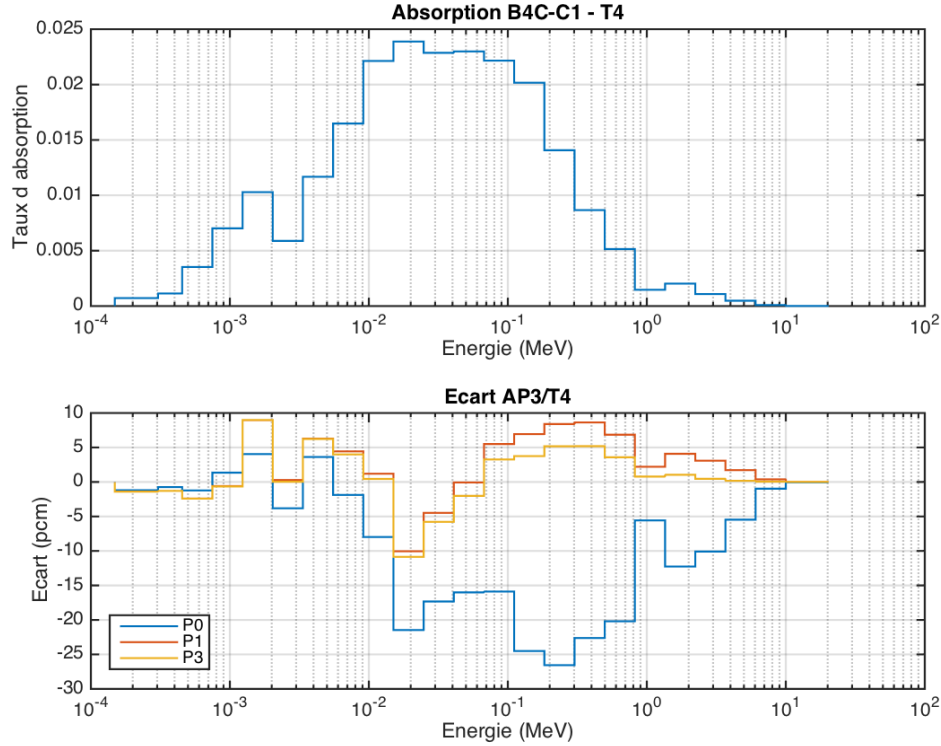


Figure 4.13 Taux d'absorption dans le B4C-C1

Tableau 4.8 Bilan cumulé de l'absorption B4C

| AP3 | $\Delta\rho$ | $\Delta A_{B4C}$ |
|-----|--------------|------------------|
| P0  | 793          | -314             |
| P1  | -93          | 167              |
| P3  | 23           | 116              |

Sur la figure 4.13, on observe une forte différence entre le calcul P0 et les calculs P1 et P3. Les variations d'écart absolu sont beaucoup plus importantes dans le cas du calcul P0. La différence entre le calcul P1 et le calcul P3 est moins importante mais visible. Les résultats du tableau 4.8 et du tableau 4.7 confirment cette observation graphique, il est nécessaire d'utiliser le calcul P3 afin de traiter correctement l'absorption du B4C ( $\Delta A(B4C)$  correspond à l'écart absolu cumulé APOLLO3/TRIPOLI sur le taux global d'absorption du B4C).

#### 4.4.4 Fission Pu239

En ce qui concerne le Pu239, on ne s'intéresse ici qu'au taux de fission, car c'est le plus significatif pour cet isotope (le taux de capture du Pu239 est présenté en annexe). Néanmoins, à titre d'information, on a indiqué les écarts cumulés à la fois pour la fission et la capture du Pu239.

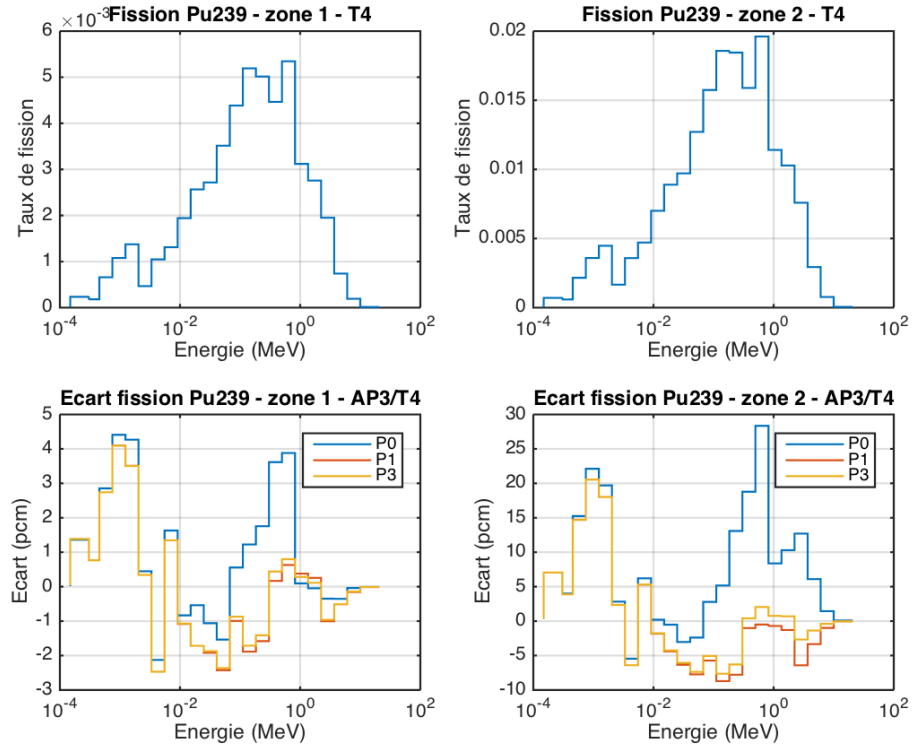


Figure 4.14 Taux de fission du Pu239 dans les zones 1 et 2

Tableau 4.9 Bilan cumulé sur le Pu239

| AP3 | $\Delta\rho$ | $\Delta F_{Pu239}$ | $\Delta C_{Pu239}$ |
|-----|--------------|--------------------|--------------------|
| P0  | 793          | 194                | -53                |
| P1  | -93          | 9                  | -77                |
| P3  | 23           | 27                 | -76                |

Sur la figure 4.14, on observe des résultats similaires pour les calculs P1 et P3 mais de plus gros écarts pour le calcul P0 surtout dans les hautes énergies. On le retrouve notamment dans l'écart cumulé sur la fission du Pu239 présenté dans le tableau 4.9. Une grosse partie de l'écart en réactivité dans le cas du calcul P0 vient de cette erreur sur le traitement de la fission du Pu239.

#### 4.4.5 Capture U238

En ce qui concerne l'U238, on ne s'intéresse ici qu'au taux de capture, car c'est le plus significatif pour cet isotope (le taux de fission de l'U238 est présenté en annexe). Néanmoins, à titre d'information, on a indiqué les écarts cumulés à la fois pour la fission et la capture de l'U238.

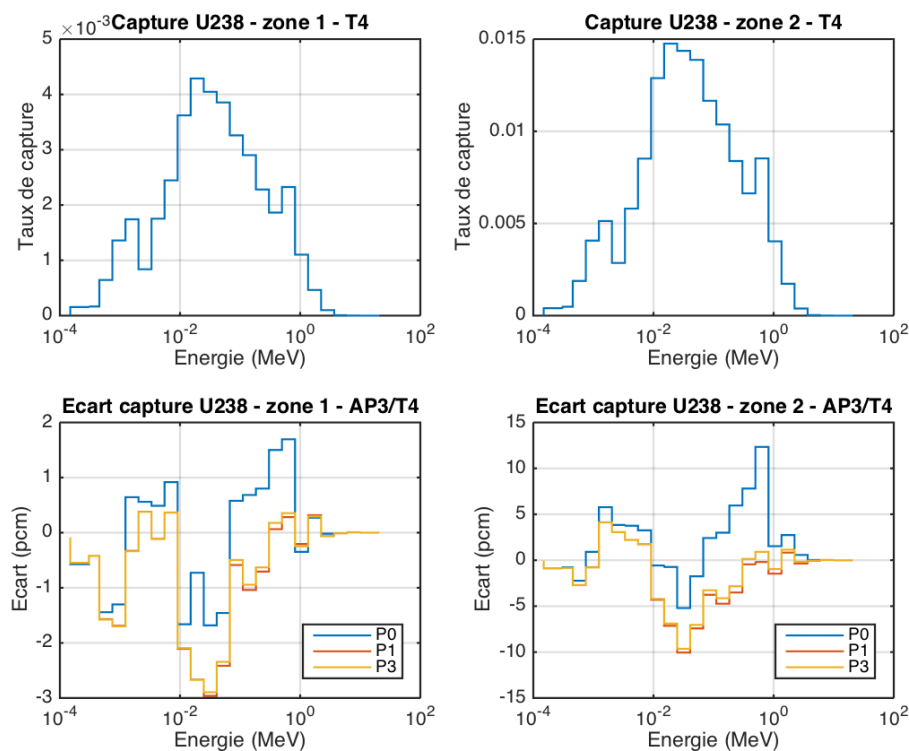


Figure 4.15 Taux de capture de l'U238 dans les zones 1 et 2

Tableau 4.10 Bilan cumulé sur l'U238

| AP3 | $\Delta\rho$ | $\Delta F_{U238}$ | $\Delta C_{U238}$ |
|-----|--------------|-------------------|-------------------|
| P0  | 793          | 47                | 40                |
| P1  | -93          | -24               | -53               |
| P3  | 23           | -11               | -47               |

Sur la figure 4.15, on observe des résultats similaires pour les calculs P1 et P3. Les écarts sont du même ordre de grandeur. On retrouve cela dans l'écart cumulé sur la capture de l'U238 présenté dans le tableau 4.10. Concernant la fission de l'U238, on observe dans le tableau 4.10 qu'elle est mieux traitée en P3.

## 4.5 Cluster Fertile - Fissile

### 4.5.1 Présentation de l'étude du cluster fertile

Dans cette dernière section, nous allons présenter l'étude d'une configuration importante : il s'agit du cluster fertile - fissile. Comme on peut le voir sur la figure 4.16, il s'agit d'un assemblage central (fertile) environné par des assemblages fissiles dans une configuration hexagonale. Cette configuration reprend la géométrie standard de l'assemblage fissile.

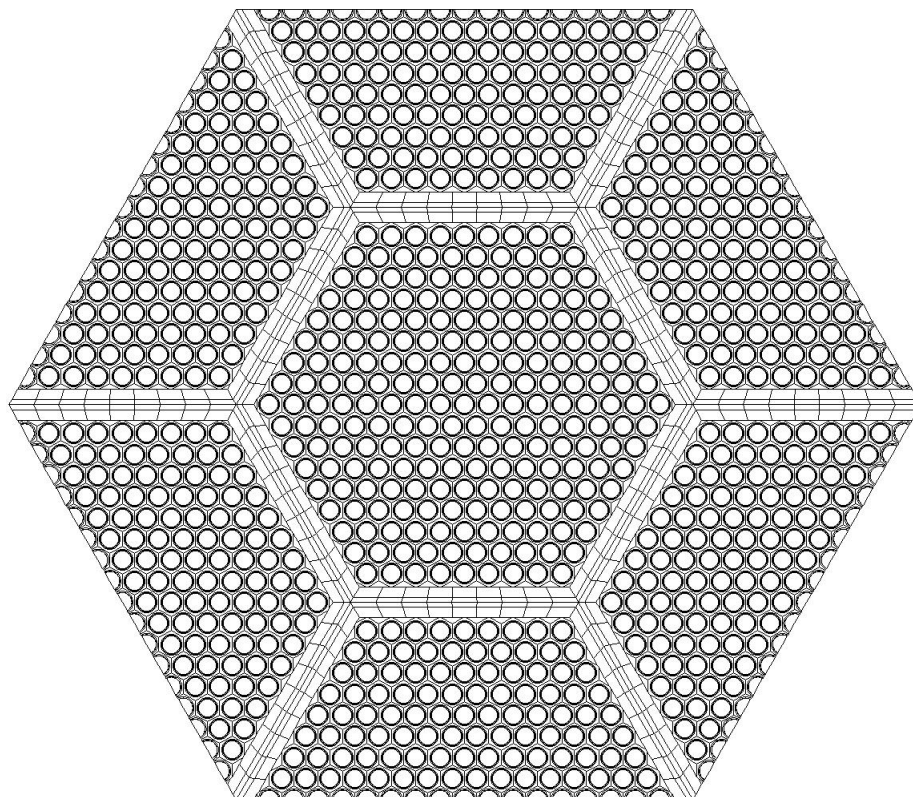


Figure 4.16 Représentation partielle d'un cluster fertile - fissile

Ce qui nous intéresse dans cette étude, c'est de voir comment le flux est traité par APOLLO3, notamment sa variation dans le cluster (matériau, géométrie). Nous allons également étudier le traitement par APOLLO3 des isotopes principaux de cette configuration (U235, U238 et Pu239). En effet, le matériau fertile est composé d'oxyde d'uranium appauvri.

### 4.5.2 Maillage de calcul 1/12

Pour procéder aux calculs APOLLO3, on utilise un maillage (figure 4.17) correspondant au douzième de la configuration 4.16.

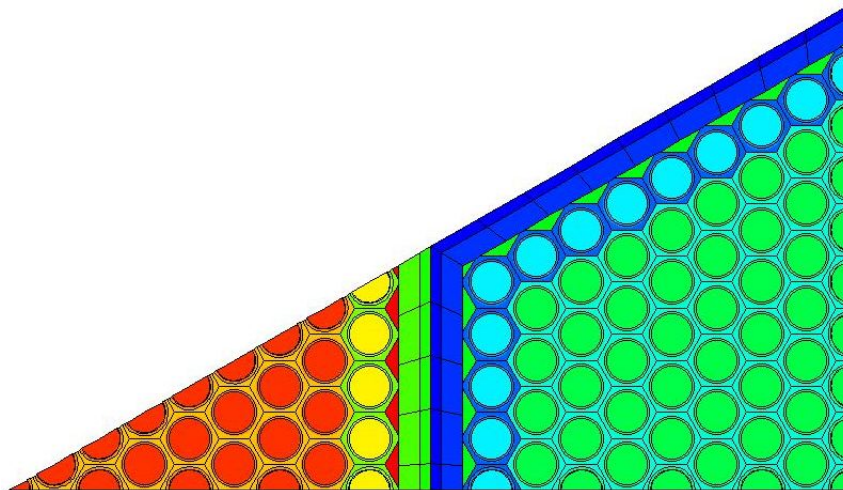


Figure 4.17 Maillage de calcul 1/12 du cluster fertile

Les combustibles fissiles des zones 1 et 2 sont respectivement en cyan et vert tandis que les matériaux fertile 1 et 2 sont respectivement en jaune et rouge. Pour le flux, nous allons représenter ce qu'on appelle une traverse : une suite d'aiguilles fissiles et fertiles situées sur le même axe (C1 à C5 pour les 5 aiguilles fissiles et F1 à F5 pour les aiguilles fertiles). La traverse où le flux sera représenté est décrite dans la figure 4.18

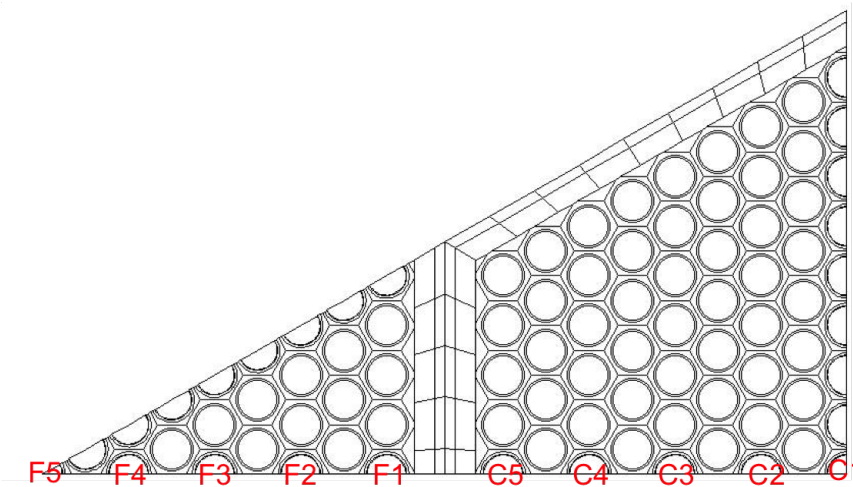


Figure 4.18 Traverse

### 4.5.3 Étude du flux moyen dans la traverse

On représente le flux pour chaque groupe et l'écart relatif entre APOLLO3 (calcul P1 et calcul P3) et TRIPOLI4 sous forme de graphique en barres (traverse). On se propose de ne tracer le flux que dans les groupes les plus significatifs.

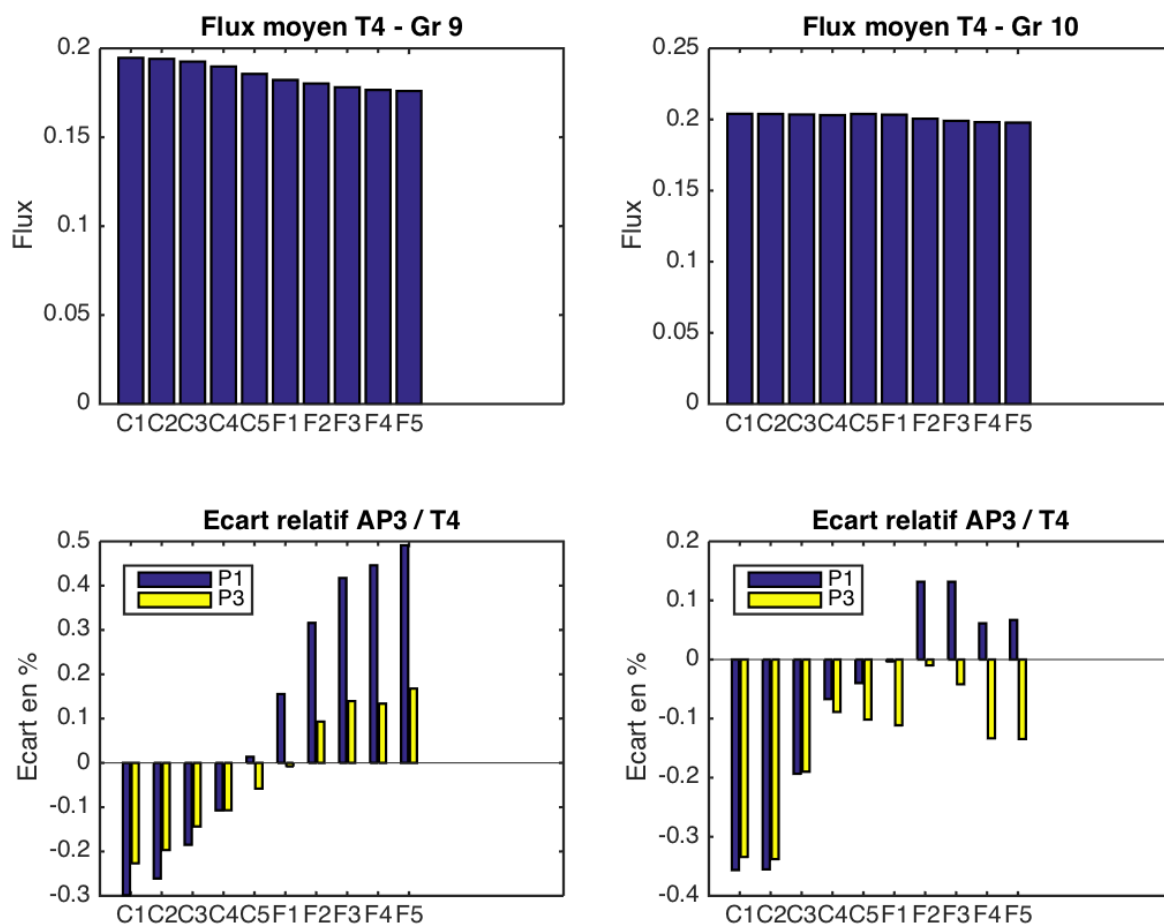


Figure 4.19 Variation du flux moyen dans la traverse - Groupes 9 et 10

Ces groupes correspondent au maximum de flux qu'on observe dans la traverse (TRIPOLI4). On note que les écarts relatifs entre APOLLO3 et TRIPOLI4 sur le flux moyen sont extrêmement faibles. On remarque également la nette amélioration apportée en P3 au niveau de l'écart relatif. Dans le groupe 10, le flux est plat.

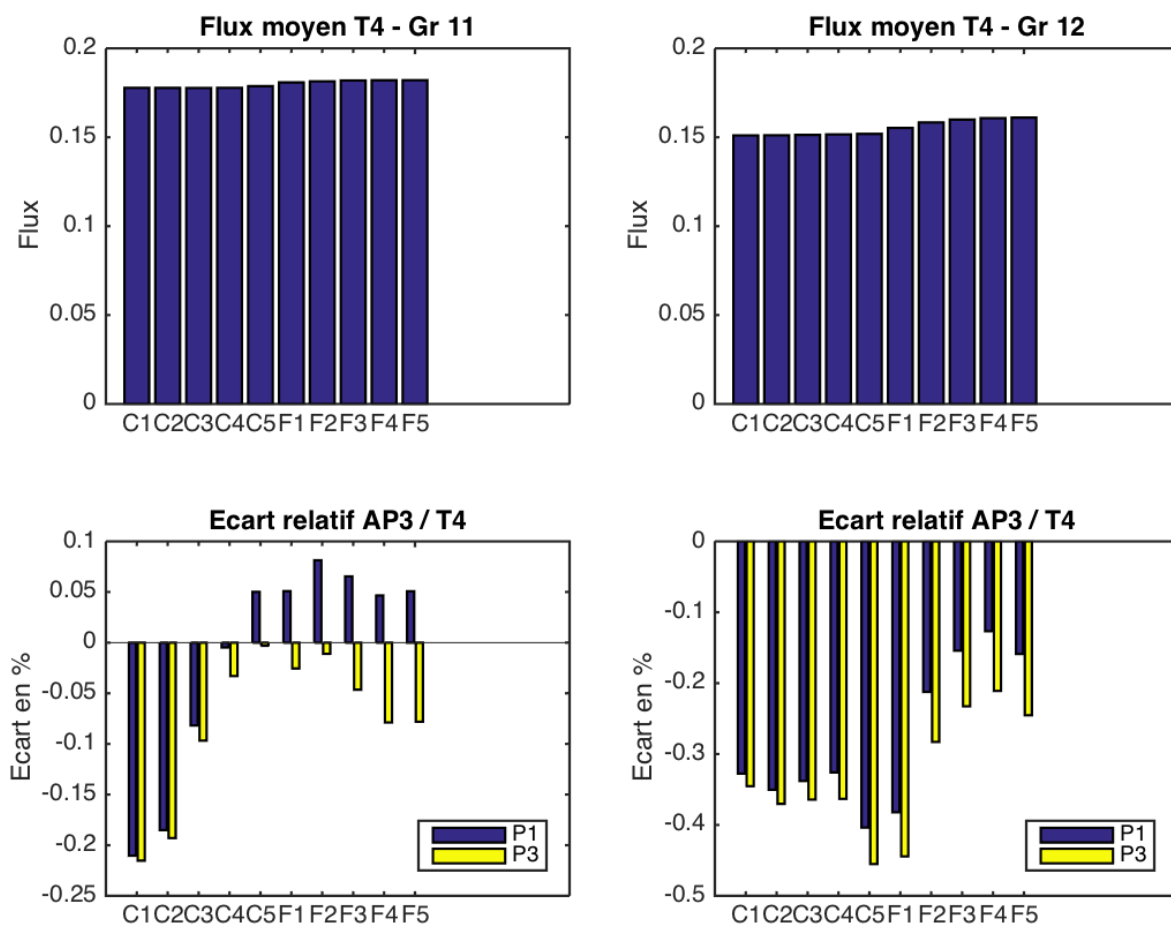


Figure 4.20 Variation du flux moyen dans la traverse - Groupes 11 et 12

À partir du groupe 11, l'allure de la courbe de variation du flux dans la traverse s'inverse, le flux moyen devient alors plus important dans le fertile que dans le fissile. Au niveau de l'écart, les résultats APOLLO3 sont aussi très bons (légèrement meilleurs en P1). On observe ici des écarts relatifs très faibles.



#### 4.5.4 Taux de fission Pu239

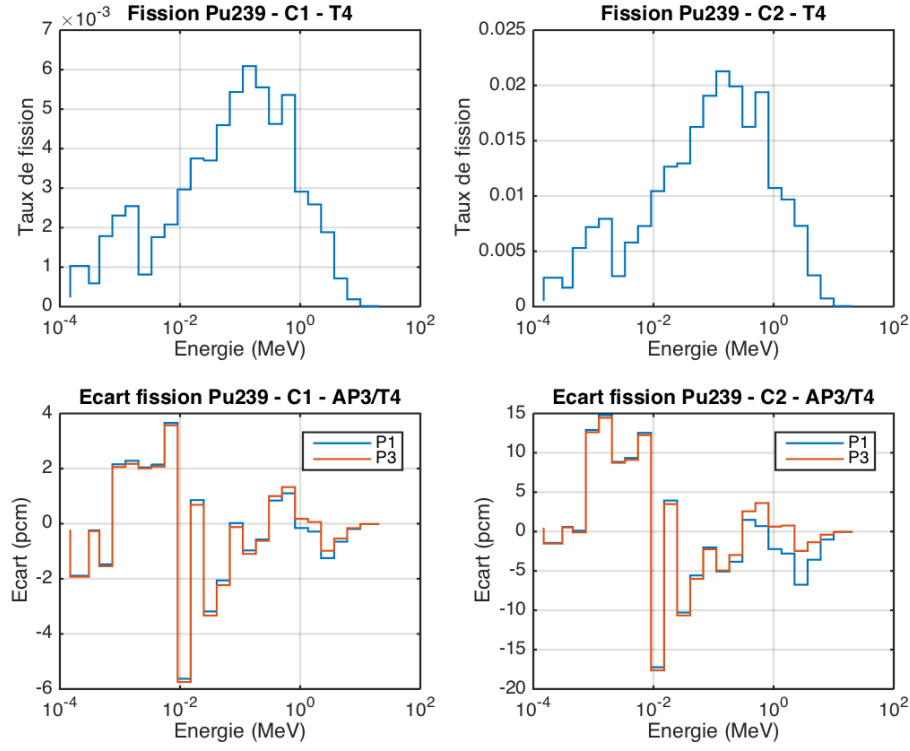


Figure 4.21 Taux de fission Pu239

Tableau 4.11 Bilan cumulé de la fission du Pu239

| AP3 | $\Delta\rho$ (AP3/T4) | $\Delta F_{Pu239}$ | $\Delta F_{Pu239,C1}$ | $\Delta F_{Pu239,C2}$ |
|-----|-----------------------|--------------------|-----------------------|-----------------------|
| P1  | -39                   | 0                  | -4                    | 4                     |
| P3  | 5                     | 15                 | -4                    | 19                    |

Sur la figure 4.21, la courbe de l'écart absolu APOLLO3 / TRIPOLI4 présente ce qu'on a observé précédemment sur la cellule et l'assemblage à savoir le pic d'écart (-20 pcm) à 10 keV. En ce qui concerne l'anisotropie, on note une différence significative autour de 1 MeV (l'écart en P3 est moins élevé qu'en P1). On peut voir à l'analyse du tableau 4.11 que le calcul P1 présente une compensation entre les écarts haute / basse énergie plus importante pour la fission du Pu239, notamment sur la dernière colonne (l'écart cumulé en P3 est plus important qu'en P1 malgré l'écart important autour du MeV en P1).

### 4.5.5 Taux de capture U238

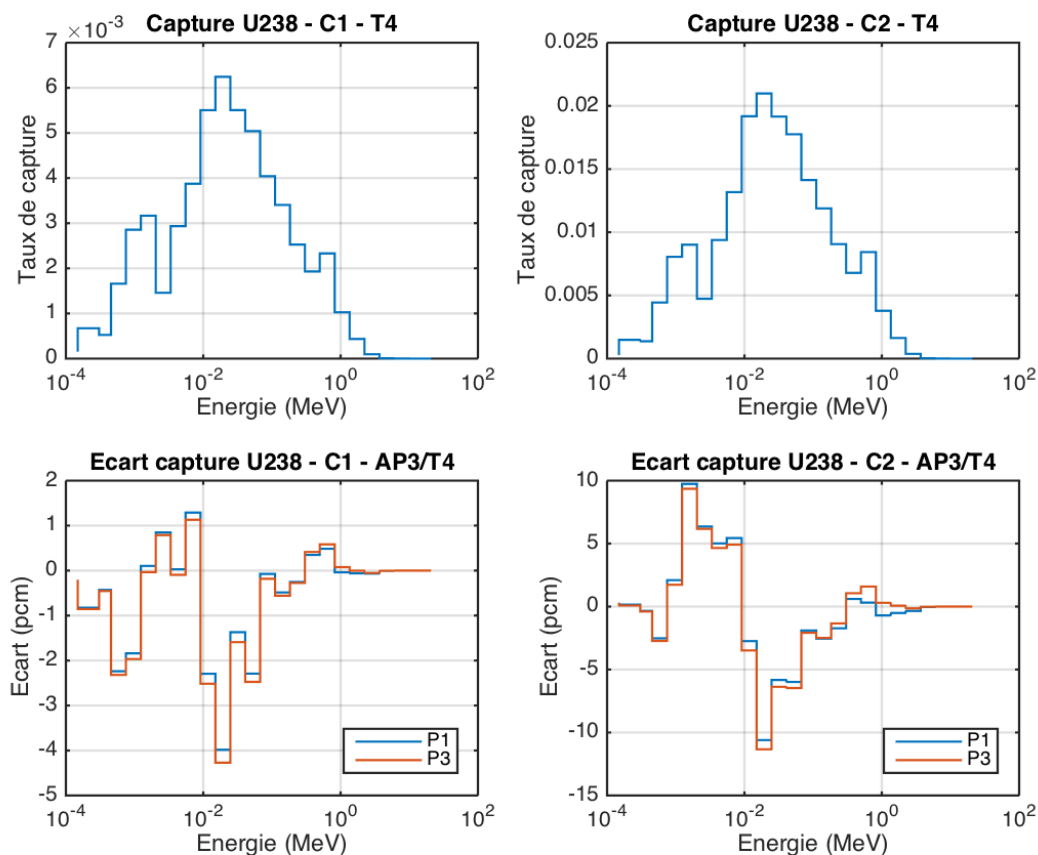


Figure 4.22 Taux de capture U238 dans le fissile

Tableau 4.12 Bilan cumulé de la capture de l'U238 dans le fissile et le fertile

| AP3 | $\Delta\rho$ (AP3/T4) | $\Delta C_{U238,fissile}$ |
|-----|-----------------------|---------------------------|
| P1  | -39                   | -19                       |
| P3  | 5                     | -22                       |

En ce qui concerne le traitement de la capture de l'U238 dans le fissile, on n'observe aucune amélioration en P3 sur la figure 4.22, ce que confirment les écarts cumulés indiqués dans le tableau 4.12. Les compensations et les écarts observés ici sont cohérents avec les résultats cellule et assemblage.

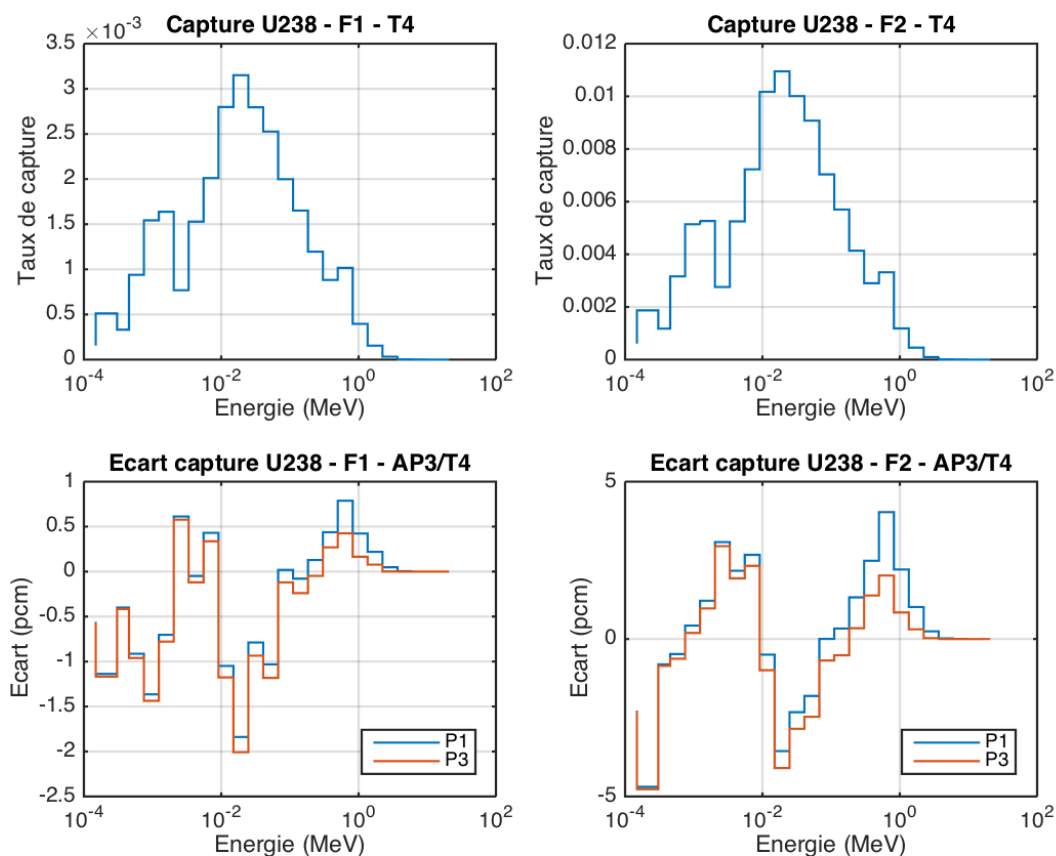


Figure 4.23 Taux de capture U238 dans le fertile

Tableau 4.13 Bilan cumulé de la capture de l'U238 dans le fissile et le fertile

| AP3 | $\Delta\rho$ (AP3/T4) | $\Delta C_{U238,fertile}$ |
|-----|-----------------------|---------------------------|
| P1  | -39                   | -2                        |
| P3  | 5                     | -16                       |

L'observation de la figure 4.23 est intéressante, en effet, à haute énergie, on observe une différence significative entre le P1 et le P3. Le calcul P1 apporte une légère compensation positive, qui se traduit dans le tableau 4.13 au niveau de l'écart cumulé (un peu moins important en P1 qu'en P3).

#### 4.5.6 Taux de fission U235

On conclut cette étude en présentant les résultats concernant le taux de fission U235. Cet isotope est moins significatif que les deux premiers mais on peut se permettre de l'utiliser pour confirmer nos observations.

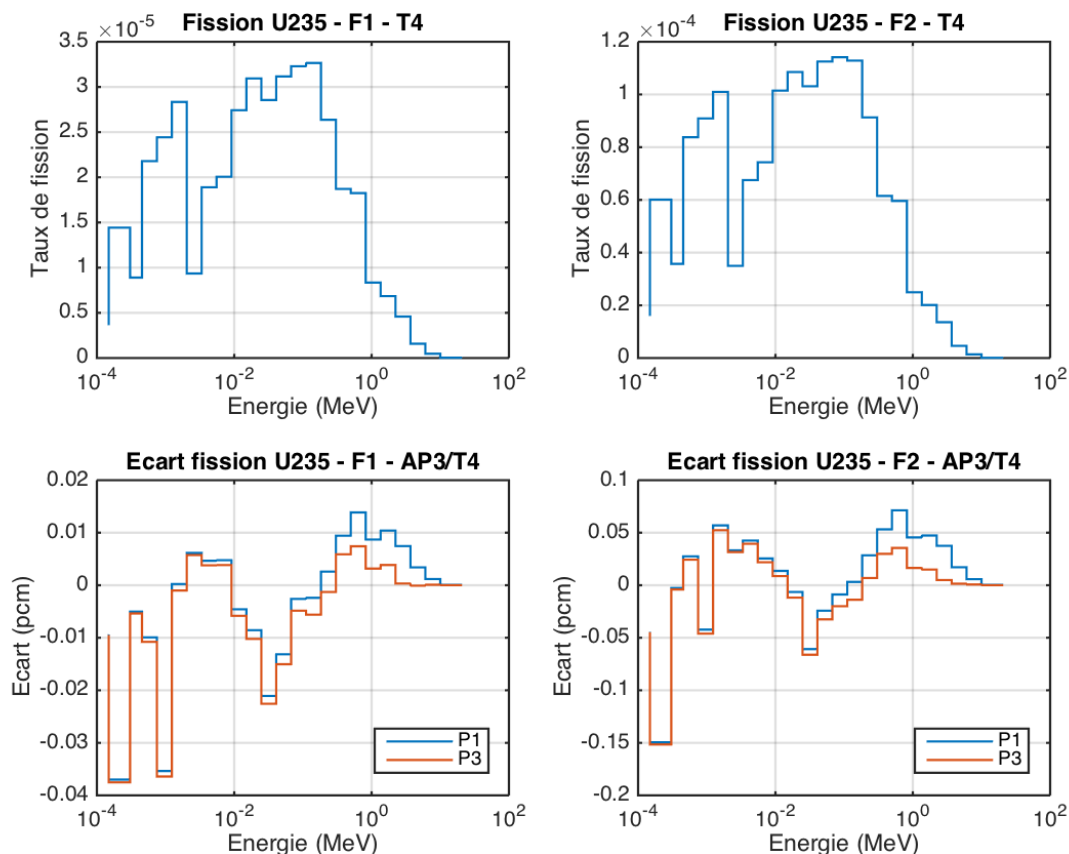


Figure 4.24 Taux de fission U235 dans le fertile

Effectivement, l'ordre de grandeur du taux de fission de l'U235 est beaucoup moins important donc les écarts en pcm sont très faibles. Néanmoins, on observe un meilleur accord avec TRIPOLI4 en P3 à haute énergie (autour de 1 MeV), effet que l'on avait également observé sur la fission de l'U238.

## CHAPITRE 5 Validation du calcul MOC 3D

Dans ce dernier chapitre, nous allons nous intéresser à la nouvelle extension en 3D du solveur MOC implémenté dans le code APOLLO3. Il s'agit d'une avancée majeure pour le code APOLLO3 qui va permettre de traiter en 3D la partie réseau. Le MOC3D a déjà implémenté de plusieurs manières dans le code DRAGON (Le Tellier *et al.* (2006), Dahmani *et al.* (2002)). L'opportunité m'a été donnée au CEA de commencer un travail préparatoire de validation sur ce solveur 3D. Par manque de temps, nous n'avons pas pu aller plus loin que la configuration cellule dans cette étude, ce qui est quelque peu dommage. Cette nouvelle fonctionnalité est particulièrement importante, car elle va permettre de traiter le Coeur Faible Vidange (CFV). En effet, celui-ci présente de fortes hétérogénéités axiales (couches fissiles et fertiles imbriquées). Cette implémentation du MOC3D dans APOLLO3 est présentée par D. Sciannandrone et S. Santandrea (Sciannandrone *et al.* (2015)) et illustrée par des comparaisons au niveau de l'assemblage.

### 5.1 Présentation de l'étude de la configuration cellule 3D

#### 5.1.1 Contexte

Nous allons étudier une cellule 3D bicouche fissile-fertile basée sur la configuration cellule 2D étudiée dans le chapitre 2. L'intérêt de cette configuration est d'étudier le comportement du code APOLLO3 au niveau de l'interface entre le combustible fissile et le matériau fertile du CFV. En effet, au niveau d'une telle interface, le gradient axial de flux est important, nous allons donc chercher à savoir si le code APOLLO3 calcule le flux aussi bien que TRIPOLI4 dans ce genre de situation.

Pour cela, nous allons utiliser des maillages axiaux plus ou moins fins (6, 17 ou 30 couches axiales, qu'on appellera 6Z 17Z et 30Z) et utiliser différents degrés d'anisotropie pour le solveur MOC (P1, P3). Comme paramètres de comparaison, nous observerons la variation axiale du flux moyen, les taux de réaction isotopiques pour les isotopes importants (U235, Pu239 et U238) par couche fissile et fertile.

En ce qui concerne le schéma de calcul pour la configuration 3D, il faut savoir que l'autoprotection est effectuée en 2D. Le calcul d'autoprotection est donc réalisé pour chaque couche de matériau fissile ou fertile et un couplage est ensuite effectué avec les sources 3D calculées par le solveur MOC. Nous savons que cette approche est limitée notamment en raison du fort gradient axial et des effets d'autoprotection entre les différentes couches.

### 5.1.2 Présentation des maillages axiaux utilisés

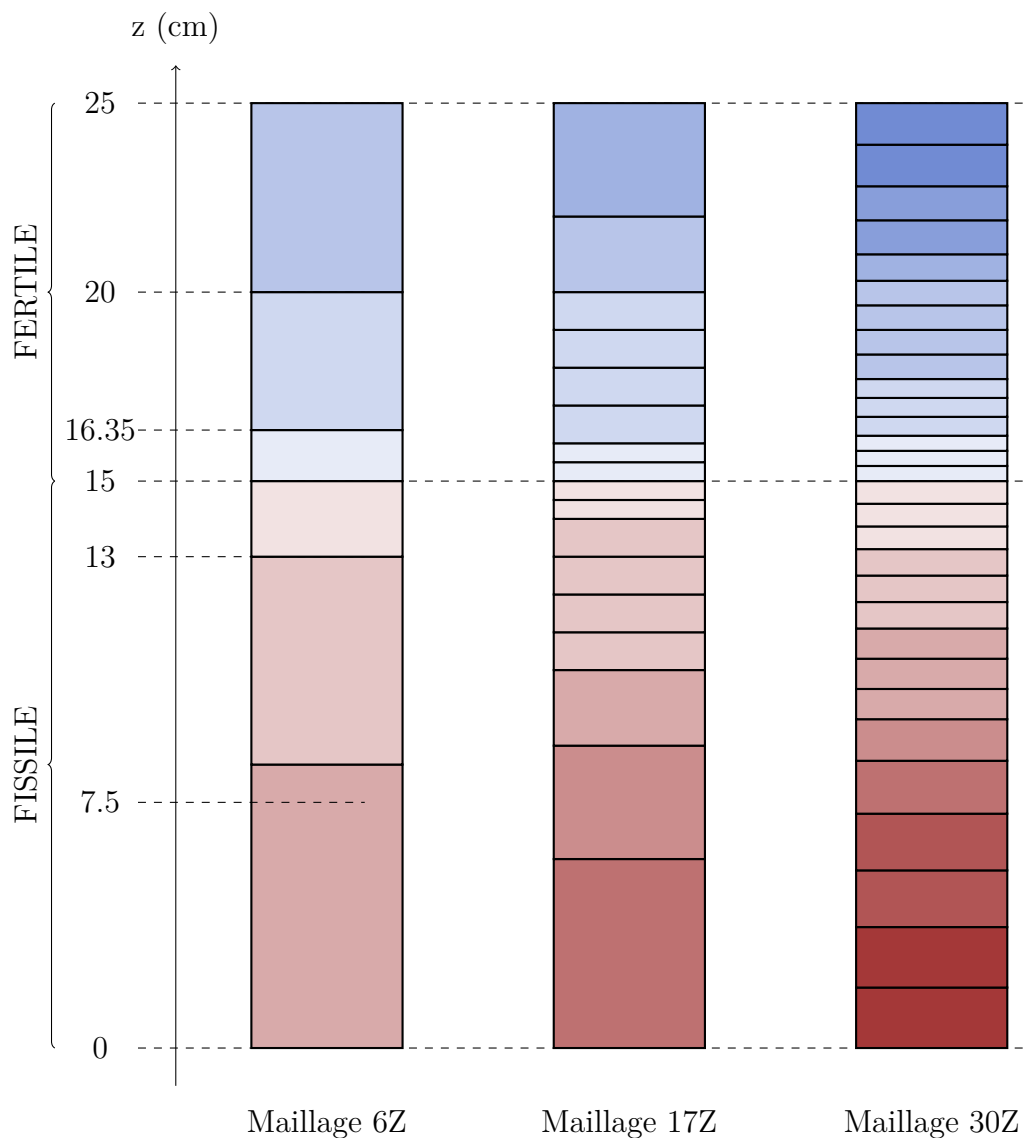


Figure 5.1 Représentation à l'échelle 1/2 des différents maillages

Cette coupe axiale ne correspond pas à la réalité de la conception du CFV. Il s'agit d'une géométrie simple utilisée pour tester le solveur MOC-3D. On cherche notamment à observer comment le code traite une interface fissile / fertile dans un cas à 3 dimensions avec des épaisseurs significatives. On met en place 3 maillages plus ou moins fins : 6Z, 17Z et 30Z (représentés dans la figure 5.1) Le premier maillage est peu raffiné et comporte des mailles très épaisses. Le second est plus raffiné, notamment au niveau de l'interface fissile / fertile. Enfin, le maillage le plus fin possède une discrétisation plus régulière.

## 5.2 Représentation de la variation axiale du flux dans la cellule 3D

Nous allons représenter la variation axiale du flux dans la cellule 3D pour les groupes énergétiques les plus significatifs, les courbes restantes seront placées en annexe.

### 5.2.1 Groupes 1-2

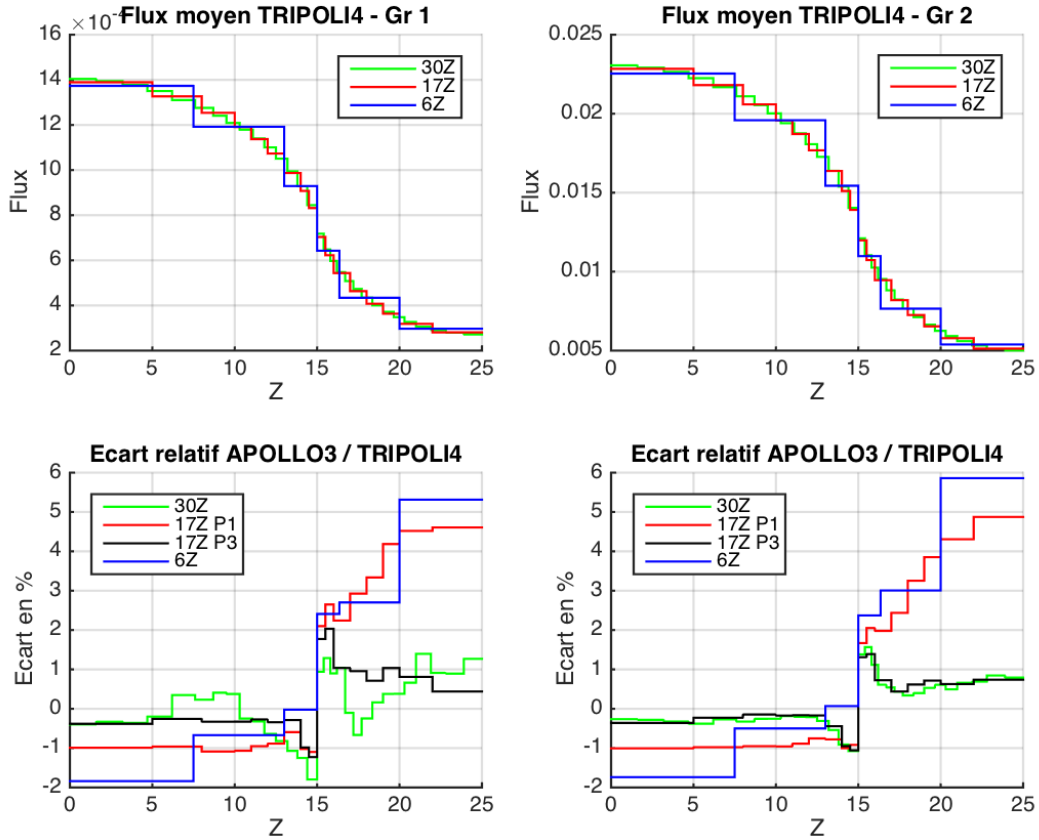


Figure 5.2 Variation axiale du flux moyen dans les groupes 1 et 2

À haute énergie, on observe une importante variation axiale du flux (rapport de 4 environ). Il faut noter la forte atténuation de l'erreur apportée par l'utilisation d'un maillage plus fin : surtout en passant de 6 à 17 zones (en passant de 17 à 30 zones la différence est beaucoup moins sensible). Le degré d'anisotropie du choc pris en compte dans le solveur MOC est également important : on le voit en comparant la variation de l'écart sur le calcul 17 zones P1 et le calcul 17 zones P3. Les calculs 6Z et 30Z ont été respectivement effectués en P1 et P3.

### 5.2.2 Groupes 9-10

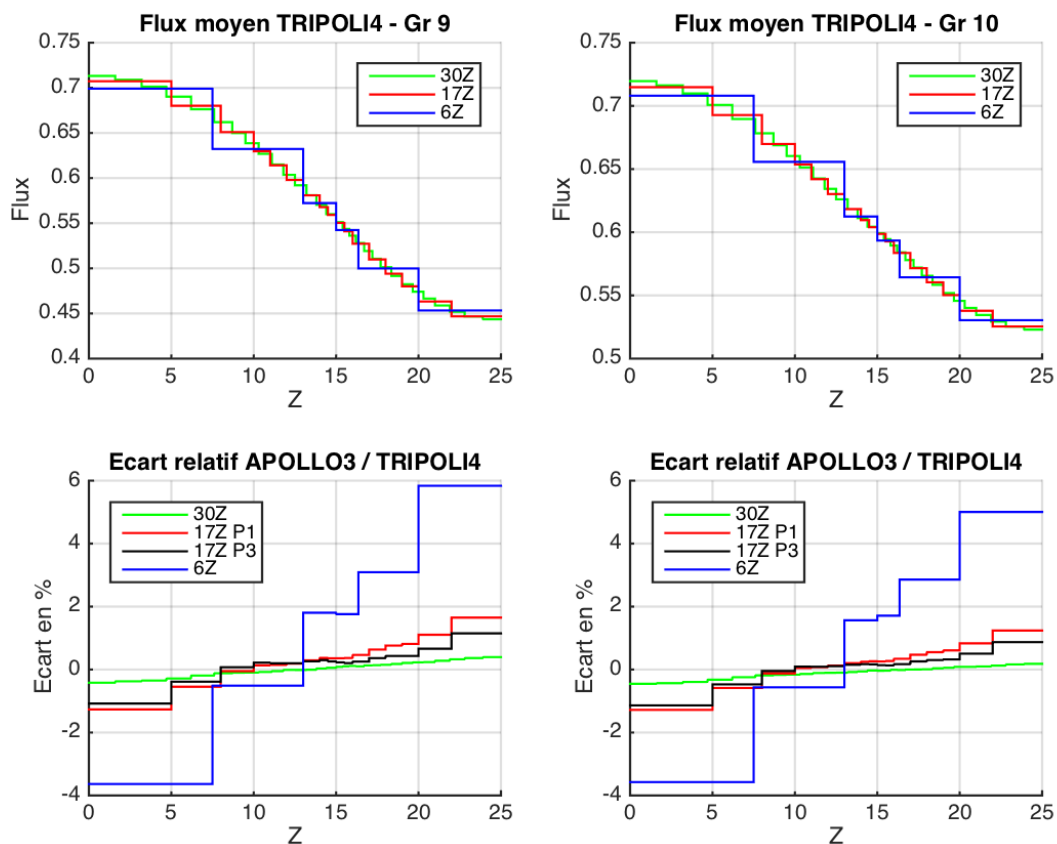


Figure 5.3 Variation axiale du flux moyen dans les groupes 9 et 10

Le flux atteint son maximum sur ces deux groupes. On observe toujours le même type d'atténuation de l'écart relatif entre les maillages 6Z et 17Z. L'écart entre les calculs P1 et P3 pour le maillage 17Z est beaucoup moins important que pour les premiers groupes d'énergie. On observe également que l'écart relatif est très faible et varie très peu pour le maillage 30Z.



### 5.2.3 Applatissage du flux : Groupes 11-12

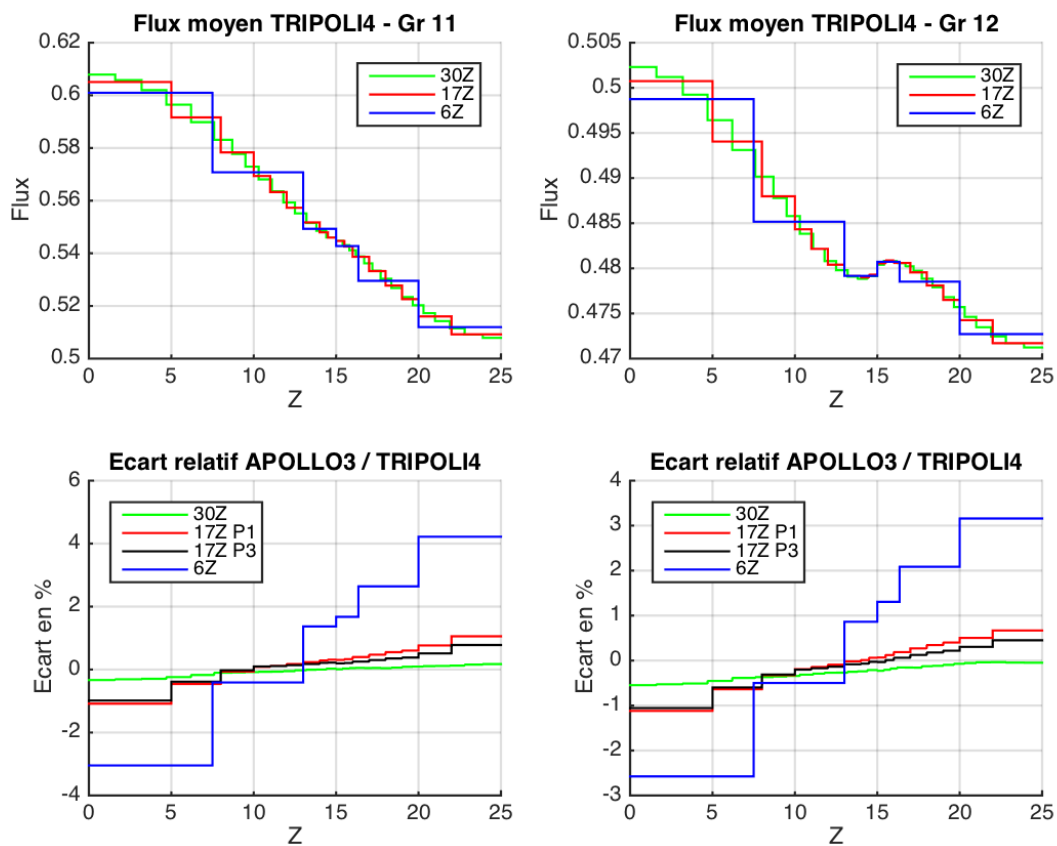


Figure 5.4 Variation axiale du flux moyen dans les groupes 11 et 12

Dans les groupes énergétiques 11 et 12, la variation axiale du flux est presque inexistante, le flux est "plat". L'erreur est atténuée de la même manière selon le maillage et le degré utilisés dans le calcul APOLLO3.

### 5.2.4 Bascullement du flux : Groupes 13-14

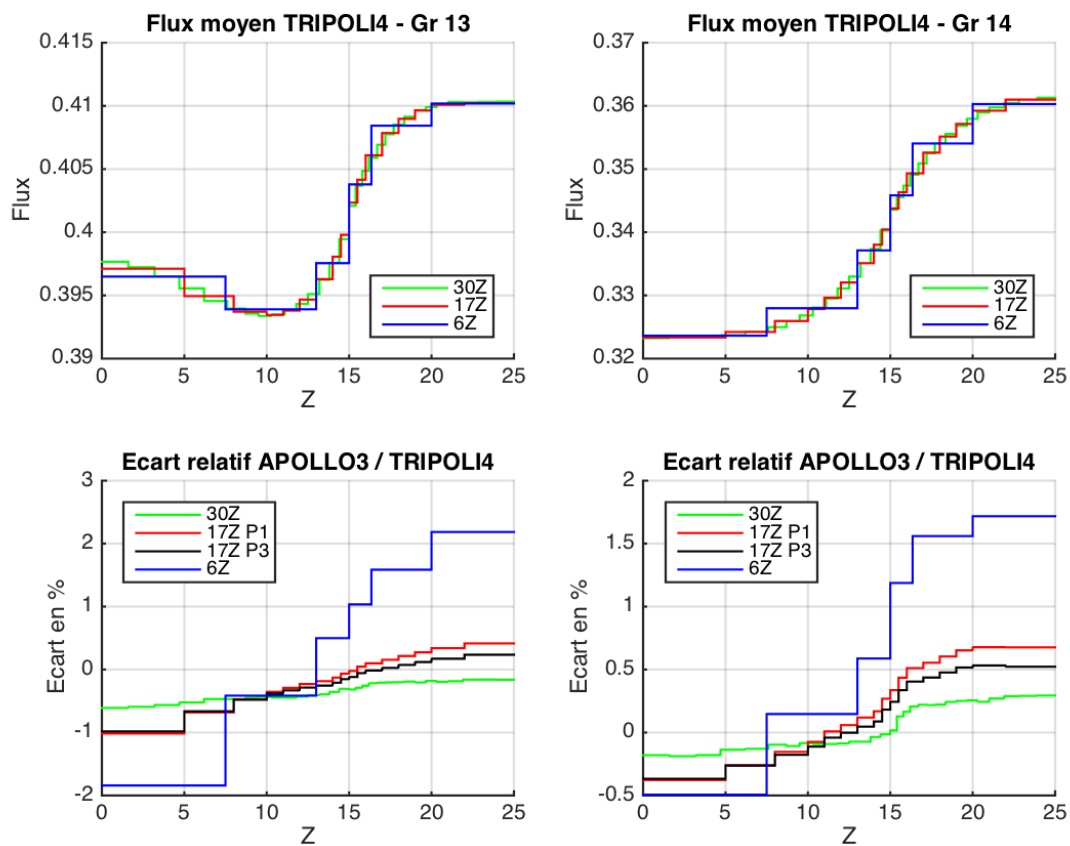


Figure 5.5 Variation axiale du flux moyen dans les groupes 13 et 14

On observe un basculement de la variation axiale du flux à partir du groupe 13 ( $E < 40$  keV). Le flux est alors plus grand dans le matériau fertile que dans le combustible fissile.

### 5.2.5 Augmentation significative de l'écart : Groupes 23-24

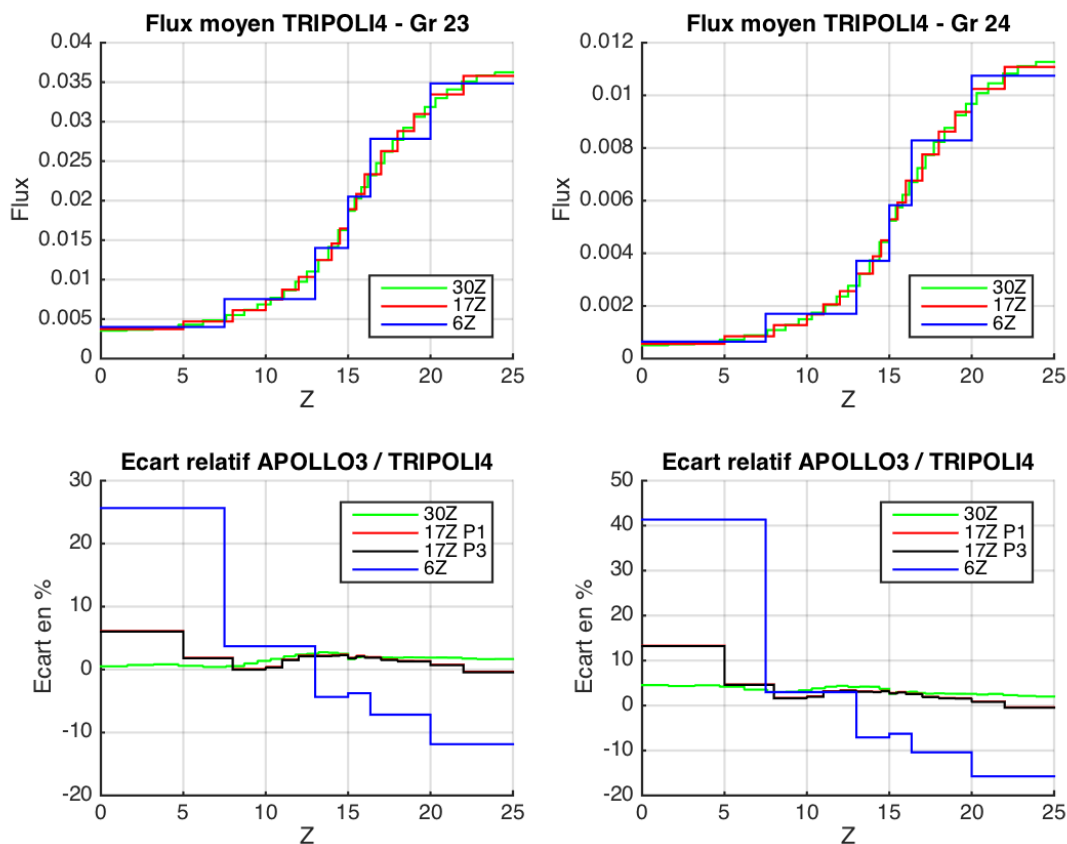


Figure 5.6 Variation axiale du flux moyen dans les groupes 23 et 24

Dans les groupes 23-24 (comme précédemment on ne regarde pas les groupes 25-33 car le flux y est quasiment nul), on observe une variation axiale du flux très importante. On voit également que l'écart relatif augmente fortement, notamment dans les couches plus épaisses de la géométrie étudiée. Cette augmentation de l'écart est d'autant plus marquée avec le maillage 6Z qu'avec les maillages 17Z et 30Z. La différence entre les maillages 17Z et 30Z est plus importante que dans les groupes étudiés précédemment. Il faut également signaler que les courbes de l'écart relatif sont très proches donc apparaissent superposés sur la figure 5.6.

### 5.3 Étude des taux de réaction isotopiques

Dans cette section, nous n'allons pas représenter tous les taux de réaction pour le Pu239, l'U238 et l'U235 mais plutôt nous focaliser sur les résultats les plus significatifs à savoir fission et capture du Pu239 ainsi que la capture U238 dans le matériau fertile et le matériau fissile.

#### 5.3.1 Erreur liée au calcul TRIPOLI4

À chaque maillage différent, il a fallu lancer un nouveau calcul TRIPOLI4 afin de disposer des sorties adaptées au maillage (notamment pour le flux) . On commence donc par présenter les résultats obtenus pour TRIPOLI4 afin de s'assurer de leur cohérence.

Tableau 5.1 Variation du  $k_{eff}$  TRIPOLI4 en fonction du maillage

| Maillage | $k_{eff}$ (TRIPOLI4) | Erreur (pcm) |
|----------|----------------------|--------------|
| 6Z       | 1,22026              | $\pm 2,6$    |
| 17Z      | 1,22023              | $\pm 1,9$    |
| 30Z      | 1,22023              | $\pm 2,7$    |

On observe dans le tableau 5.1 que les erreurs à  $1\sigma$  sont très faibles (inférieurs à 3 pcm). Par ailleurs, on a 3 pcm d'écart entre les différents calculs. Les résultats sont cohérents entre eux.

#### 5.3.2 Erreur sur le taux de fission et de capture Pu239

Tableau 5.2 Écart sur le taux de fission Pu239

| Calcul | $k_{eff}$ (AP3) | $\Delta\rho$ (AP3/T4) | $\Delta F_{Pu239}$ |
|--------|-----------------|-----------------------|--------------------|
| 6Z P1  | 1,21522         | -340                  | -123               |
| 17Z P1 | 1,21803         | -148                  | -53                |
| 17Z P3 | 1,21916         | -72                   | -26                |
| 30Z P3 | 1,21969         | -36                   | -11                |

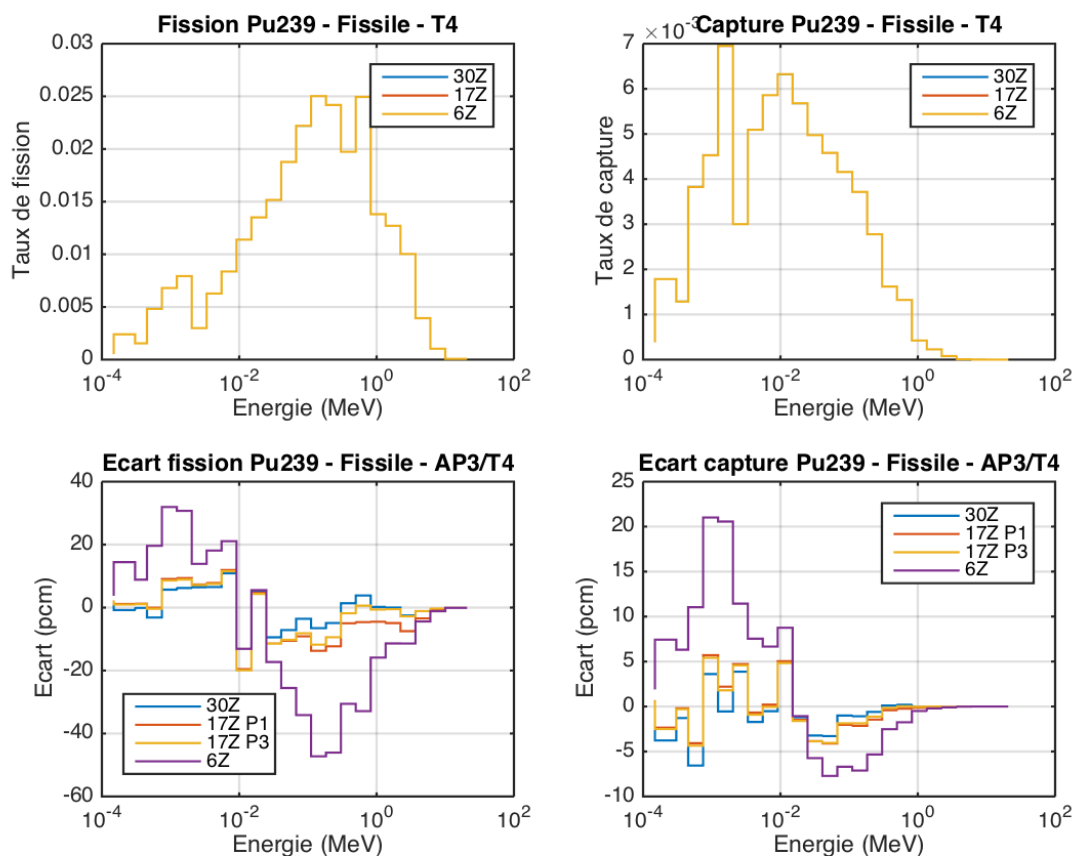


Figure 5.7 Représentation du taux de fission et de capture du Pu239 dans le combustible fissile

Les compensations visibles sur la courbe de l'écart APOLLO3 - TRIPOLI4 (figure 5.7) sont fortement atténuées quand on passe du maillage 6Z au maillage 17Z, mais le sont moins quand on passe du 17Z au 30Z car les résultats APOLLO3 convergent vers ceux de TRIPOLI4. Il faut relier cela avec les écarts cumulés indiqués dans le tableau 5.2. On voit dans ce dernier que l'écart cumulé sur la fission du Pu239 est fortement réduit avec les maillages 17Z et 30Z. On voit également que les compensations sur la capture du Pu238 sont bien moindres avec un maillage plus fin.

### 5.3.3 Erreur sur le taux de capture U238

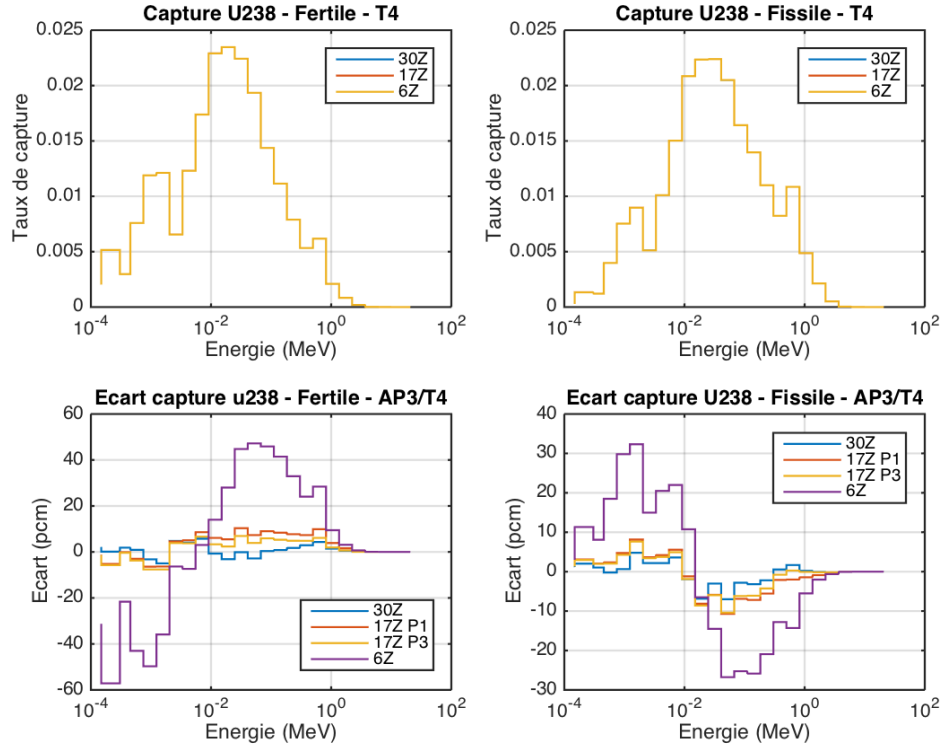


Figure 5.8 Représentation du taux de capture U238 dans le combustible fissile et le matériau fertile

Tableau 5.3 Écart lié au taux de capture U238

| Calcul | $k_{eff}(AP3)$ | $\Delta\rho(AP3/T4)$ | $\Delta C_{U238,fissile}$ | $\Delta C_{U238,fertile}$ |
|--------|----------------|----------------------|---------------------------|---------------------------|
| 6Z     | 1,21522        | -340                 | 17                        | 70                        |
| 17Z P1 | 1,21803        | -148                 | -17                       | 73                        |
| 17Z P3 | 1,21916        | -72                  | -12                       | 34                        |
| 30Z P3 | 1,21969        | -35                  | -7                        | 17                        |

Que ce soit dans le matériau fissile ou le matériau fertile, le traitement de la capture U238 est fortement amélioré (écart cumulé et compensations) avec le maillage fin 30Z.

Dans ce chapitre, nous avons donc fait une première étude grossière de la configuration 3D fissile/fertile du CFV. Nous avons observé la nécessité d'utiliser le maillage le plus fin possible afin de faire converger les résultats APOLLO3 vers les résultats TRIPOLI4. Le degré d'anisotropie du choc pris en compte dans les options du solveur MOC-3D est également important.

Des développements polynomiaux du flux suivant  $z$  sont prévus afin de réduire le nombre de mailles axiales.

Pour continuer sur cette lancée, il faudrait passer à l'étude de la configuration assemblage 3D. On pourrait ainsi comparer les résultats cellule - assemblage par la même approche que ce qui a été fait dans les chapitres 3 et 4. Néanmoins, ce travail a été réalisé par D. Sciannandrone et présenté à la conférence M&C 2015 ((Sciannandrone *et al.*, 2015)).

## CHAPITRE 6 CONCLUSION

### 6.1 Synthèse des travaux

L'objectif de ce travail était de proposer une validation à burnup 0 du schéma de calcul réseau APOLLO3 du coeur CFV d'ASTRID. Cette validation non exhaustive a néanmoins été faite avec la volonté de couvrir le plus de configurations possibles et d'explorer de nouvelles possibilités. Nous avons utilisé différentes configurations basées sur l'aiguille fissile, l'assemblage fissile, fertile ainsi qu'une configuration 3D. Différents types d'étude ont été effectuées : géométrie, effets de vidange, impact du maillage énergétique AEMC-RNR-1200 (cas cellule unique), impact de l'évaluation JEFF3.2 pour le Pu239 (cas cellule unique).

La première étape de validation, le calcul cellule, nous a mené vers des conclusions intéressantes. Tout d'abord, nous avons vu que la configuration géométrique pour la cellule utilisée dans les études de prédéfinition (configuration standard) était suffisamment hétérogène. En effet, les milieux vides qu'elle comporte sont nécessaires afin de tester le comportement du solveur de flux dans les milieux vides. Nous avons détecté un premier problème : le traitement de la fission du Pu239 (écart important autour de 10 keV). Néanmoins, la nouvelle évaluation JEFF3.2 permet de régler ce problème en diminuant de façon importante les compensations sur le taux de fission du Pu239. Une autre possibilité mise en avant pour combler cet écart est d'utiliser un maillage plus adapté du type AEMC-RNR-1200 groupes. Enfin, l'étude de vidange sodium sur la cellule a permis de confirmer le bon comportement du code APOLLO3 en situation accidentelle. En effet, les écarts en réactivité en vidange (effet de vidange) calculés pour TRIPOLI4 et APOLLO3 sont cohérents et très proches.

En passant à l'étude de l'assemblage fissile, on a cherché à retrouver les mêmes conclusions. Effectivement, le traitement de la fission du Pu239 reste problématique dans le cas de l'assemblage fissile : la fission du Pu239 y est même surestimée de façon plus importante en dessous de 10 keV. En l'absence de fonctionnalités de type perturbation permettant une décomposition précise des écarts en réactivité, nous nous sommes focalisés sur le boîtier d'acier : seule structure qui apparaît avec le passage de la cellule à l'assemblage. La diffusion du Fe56 dans le boîtier EM10 est traitée avec un écart relatif conséquent entre APOLLO3 et TRIPOLI4. Nous avons creusé plusieurs pistes qui se sont avérées infructueuses : remplacement de l'EM10 par du Fe56 afin d'éliminer le mélange de la liste des causes probables, remplacement de l'EM10 par du sodium afin de voir si le tube est la seule cause de la surestimation de la fission du Pu239. L'étude de cette hypothèse n'a pas abouti. En effet, l'écart cumulé sur la fission du Pu239 est resté sensiblement le même en remplaçant l'EM10 par du Na23.



Malheureusement, nous n'avons pas eu le temps de tester sur l'assemblage fissile le maillage AEMC-RNR-1200 ainsi que la bibliothèque JEFF3.2 pour le Pu239.

Nous avons ensuite complété notre travail de validation par une étude d'un cluster B4C : il s'agit d'une configuration de barres absorbantes environnées d'assemblages fissiles. Cette étude a montré la nécessité de tenir compte de l'anisotropie de la loi de choc à l'ordre 3 au moins, dans le but d'obtenir un écart sur l'absorption du B4C suffisamment faible. Pour terminer sur l'assemblage, nous avons décidé de nous intéresser à un cluster fissile / fertile : un assemblage fertile entouré d'assemblages fissiles. Notre axe de travail était principalement l'étude de la variation du flux le long d'une traverse (ici il s'agit d'un segment qui traverse le cluster en son centre). Le flux est maximal dans le fissile et minimal dans le fertile pour les premiers groupes du maillage, puis s'applatit et devient minimal dans le fissile et maximal dans le fertile pour des énergies inférieures ( $< 100$  keV). L'écart relatif sur le flux et les taux de fission, capture du Pu239 et de l'U238 sont peu élevés. Les résultats sont très satisfaisants.

Enfin, nous avons également pu tester le solveur MOC-3D dans le cas d'une configuration cellule 3D. Cela nous a permis notamment d'observer la forte variation axiale du flux dans une interface fissile / fertile. Néanmoins, ce modèle 3D a des limites (flux constant dans chaque tranche) qui devront être dépassées en utilisant de nouvelles modélisations (représentation polynômiale du flux suivant  $z$ ). La variation axiale du flux est ici d'un ordre de grandeur beaucoup plus important que dans le cas du cluster 2D. À haute énergie, le flux est au plus haut dans le matériau fissile et au plus bas dans le matériau fertile tandis qu'à plus basse énergie ( $< 40$  keV) on observe un basculement de la variation axiale du flux.

## 6.2 Limitations du travail effectué

L'absence d'un modèle de perturbations et d'un outil automatisé de validation pour le code APOLLO3 imposent des choix sur les données produites qui seront analysées. Par exemple, il a fallu se limiter aux isotopes les plus significatifs (Pu239, U238, U235, Na23, Fe56) pour certains types de réaction (diffusion, fission, capture). Par manque de temps, nous n'avons pas pu tester le maillage AEMC-RNR-1200 et la bibliothèque JEFF3.2 du Pu239 sur l'assemblage fissile. Concernant la configuration 3D, l'assemblage n'a pas été étudié par manque du temps, ce calcul nous aurait permis de faire le même type de comparatif que ce qui a été fait pour le passage de cellule à assemblage en 2D.

## **6.3 Perspectives et améliorations futures**

### **6.3.1 Schéma de calcul**

Les améliorations proposées au CEA pour faire avancer le schéma de calcul du code APOLLO3 sont nombreuses. La réalisation de calculs en évolution et leur validation par TRIPOLI4 est la prochaine étape qui sera possible avec la mise en service du nouveau module d'évolution isotopique MENDEL du code APOLLO3. En ce qui concerne le calcul dans le cas d'une configuration 3D, il est prévu de mettre en place une nouvelle approximation. En effet, en raison de l'autoprotection par couches et du couplage autoprotection / MOC-3D, les fuites neutroniques entre les différentes couches de matériau (fertile ou fissile) ne sont pas prises en compte dans le calcul de la "source" permettant d'obtenir les sections autoprotégées. Le SERMA a l'objectif de coder rapidement ce terme de fuites axiales.

### **6.3.2 Diminution du temps de calcul**

La principale voie d'amélioration pour les codes déterministes (afin de rattraper les codes Monte-Carlo) est de paralléliser les calculs. La parallélisation du MOC et du PIJ dans le code réseau d'APOLLO3 est en cours de développement et de vérification par le SERMA. Les gains potentiels en temps de calcul sont très importants et vont permettre d'utiliser des méthodes de transport exactes en routine.

### **6.3.3 Outils de validation**

Le SERMA développe actuellement un outil de comparaison automatisé fonctionnant avec des fichiers hiérarchisés de type HDF5. Parallèlement, il est prévu de produire les données de sortie APOLLO3 et TRIPOLI4 sous forme d'un fichier HDF5. En combinant ces améliorations, le post-traitement et donc la comparaison entre APOLLO3 et TRIPOLI4 vont être grandement facilités.

## RÉFÉRENCES

- ASKEW, J. R. (1972). A Characteristics Formulation of the Neutron Transport Equation in Complicated Geometries. Rapport technique, United Kingdom Atomic Energy Establishment, Winfrith, UK. AEEW-M 1108.
- BAUDRON, A.-M. et LAUTARD, J.-J. (2011). Simplified PN Transport Core Calculations in the APOLLO3 System. *International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering (M&C 2011)*. Rio de Janeiro, Brazil.
- CALLOO, A. (2012). *Développement d'une nouvelle modélisation de la loi de choc dans les codes de transport déterministe*. Thèse de doctorat, LEPh, CEA Cadarache.
- COSTE-DELCLAUX, M. (2008). GALILEE : A Nuclear Data Processing System for Transport, Depletion and Shielding Codes. *Workshop on Processing Tools for Evaluated Nuclear Data Libraries*. Issy les Moulineaux, France.
- COSTE-DELCLAUX, M., DIOP, C., GABRIEL, F., LAUTARD, J.-J., MAGNAUD, C., MALVAGI, F., NAURY, S. et NICOLAS, C. (2013a). *La neutronique*. Editions Le Moniteur.
- COSTE-DELCLAUX, M., DIOP, C., GABRIEL, F., LAUTARD, J.-J., MAGNAUD, C., MALVAGI, F., NAURY, S. et NICOLAS, C. (2013b). *La neutronique*. Editions Le Moniteur.
- DAHMANI, M., WU, G. J., ROY, R. et KOCLAS, J. (2002). Development and Parallelization of the Three-Dimensional Parallelization Characteristics Solver MCI of DRAGON. *International Conference on the Physics of Reactors (PHYSOR 2002)*. Séoul, South Korea.
- DE SAINT-JEAN, C. et AL. (2007). Status of CONRAD, A Nuclear Reaction Analysis Tool. *International Conference on Nuclear Data for Science and Technology (ND 2007)*. Nice, France.
- DIOP, D. et AL. (2007). TRIPOLI-4 : A 3D Continuous Energy Monte Carlo Transport Code. *International Conference on Physics and Technology of Reactors and Applications (PHYTRA-1)*. Marrakech, Morocco.
- GOLFIER, H., LENAIN, R., CALVIN, C., LAUTARD, J.-J., BAUDRON, A.-M., FOUGERAS, P., MAGAT, P., MARTINOLLI, E. et DUTHEILLET, Y. (2009). APOLLO3 : A Common Project of CEA, AREVA and EDF for the Development of a New Deterministic Multi-Purpose Code for Core Physics Analysis. *International Conference on Mathematics, Computational Methods & Reactor Physics*. Saratoga Springs, NY, USA.
- HALSALL, M. J. (1980). A Characteristics Solution to the Neutron Transport Equation in Complicated Geometries. Rapport technique, United Kingdom Atomic Energy Establishment, Winfrith, UK. AEEW-R 1291.

- HÉBERT, A. (2009a). *Applied Reactor Physics*. Presses Internationales Polytechniques.
- HÉBERT, A. (2009b). Development of the Subgroup Projection Method for Resonance Self-Shielding Calculations. *Nuclear Science and Engineering*, **162**, 56–75.
- LE TELLIER, R. (2006). *Développement de la méthode des caractéristiques pour le calcul de réseau*. Thèse de doctorat, École Polytechnique de Montréal.
- LE TELLIER, R. et HÉBERT, A. (2006). On the Integration Scheme Along a Trajectory for the Characteristics Method. *Annals of Nuclear Energy*, **33**, 1260–1269.
- LE TELLIER, R., HÉBERT, A. et MARLEAU, G. (2006). The Implementation of a 3D Characteristics Solver for the Generation of Incremental Cross Sections for Reactivity Devices in a CANDU Reactor. *International Conference on the Physics of Reactors (PHYSOR 2006)*. Vancouver, BC, Canada.
- MACFARLANE, R. E., MUIR, D., BOICOURT, R. M. et KAHLER, A. C. (2015). *The NJOY Nuclear Data Processing System, Version 2012*. Los Alamos National Laboratory, Theoretical Division.
- MOLLER, J.-Y., LAUTARD, J.-J. et SCHNEIDER, D. (2011). MINARET : A Deterministic Neutron Transport Solver for Nuclear Core Calculations. *International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering (M&C 2011)*. Rio de Janeiro, Brazil.
- MOSCA, P. (2009). *Conception et développement d'un maillage énergétique adaptatif pour la génération des bibliothèques multigroupes des codes de transport*. Thèse de doctorat, Université Paris Sud - Paris XI.
- MOSCA, P., MOUNIER, C., BELLIER, P. et ZMIJAREVIC, I. (2012). Improvements in Transport Calculations by the Optimized Multigroup Libraries for Fast Neutron Systems. *International Conference on the Physics of Reactors (PHYSOR 2012)*. Knoxville, TN, USA.
- MOUNIER, C. et NORMAND, B. (2008). Fission Source Calculations and its Influence in Criticality applications. *International Conference on the Physics of Reactors (PHYSOR 2008)*. Interlaken, Switzerland.
- NOGUERE, G., ARCHIER, P., BOULAND, O., VAGLIO-GAUDARD, C. et KONING, A. (2011). Contribution to the URR Analysis for JEFF : New URR Representation with CONRAD/ECIS/TALYS. *JEF/DOC-1409b*. NEA, Paris, France.
- RIMPAULT, G. et AL. (2002). The ERANOS Code and Data System for Fast Reactor Neutronic Analyses. *International Conference on the Physics of Reactors (PHYSOR 2002)*. Seoul, South Korea.

- SANCHEZ, R. (2015). A new Derivation of the Doppler-Broadened Kernel for Elastic Scattering and Application to Upscattering Analysis in the Resonance Range of  $^{238}\text{U}$ . *Joint International Conference on Mathematics and Computation (M&C), Supercomputing in Nuclear Applications (SNA) and the Monte Carlo (MC) Method*. Nashville, TN, USA.
- SANCHEZ, R. et CHETAINE, A. (1999). Synthetic Acceleration for a 2d Characteristic Method in Non Regular Meshes. *International Conference on Mathematics and Computation, Reactor Physics and Environmental Analyses in Nuclear Applications (M&C 1999)*. Madrid, Spain.
- SANCHEZ, R., HEWKO, C. et SANTANDREA, S. (2013). Numerical Computation of Doppler-Broadening in the Resonance Domain. *International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering (M&C 2013)*. Sun Valley, ID, USA.
- SANCHEZ, R., MONDOT, J., STANKOVSKI, Z., COSSIC, A. et ZMIJAREVIC, I. (1988). APOLLO2 : A User Oriented, Portable, Modular Code for Multigroup Transport Assembly Calculations. *Nuclear Science and Engineering*, 1100, 352–362.
- SCIANNANDRONE, D., SANTANDREA, S., SANCHEZ, R., LEI-MAO, L., VIDAL, J., PALAU, J. et ARCHIER, P. (2015). Couple Fine-Group Three-Dimensional Flux Calculation and Subgroups Method for a FBR Hexagonal Assembly with the APOLLO3 Core Physics Analysis Code. *Joint International Conference on Mathematics and Computation (M&C), Supercomputing in Nuclear Applications (SNA) and the Monte Carlo (MC) Method*. Nashville, TN, USA.
- SUBLET, J.-C., RIBON, P. et COSTE-DELCLAUX, M. (2011). *CALENDF-2010 : USER MANUAL*. CEA Saclay, cea-r-6277 édition.
- TOUMI, I., BERGERON, A., GALLO, D., ROYER, E. et CARUGE, D. (2000). FLICA4 : A Three-Dimensional Two-Phase Flow Computer Code with Advanced Numerical Methods for Nuclear Applications. *Nuclear Engineering and Design*, 200, 139–155.
- TSILANIZARA, A. et AL. (1999). DARWIN : An Evolution Code System for a Large Range of Applications. *International Conference on Radiation Shielding(ICRS-9)*. Tsukaba, Japan.
- VARAINE, F. (2014). *Les réacteurs nucléaires à caloporteur sodium*, Editions Le Moniteur. 39–44.
- ZMIJAREVIC, I. (1999). Multidimensional Discrete Ordinates Nodal and Characteristics Methods for the APOLLO2 Code. *International Conference on Mathematics and Computation, Reactor Physics and Environmental Analyses in Nuclear Applications (M&C 1999)*. Madrid, Spain.

# **ANNEXE A : Maillage énergétique**

Tableau A.1 Maillage énergétique 33 groupes ECCO

| Groupe | Sup (MeV)    | Inf (MeV)    | Groupe | Sup (MeV)    | Inf (MeV)    |
|--------|--------------|--------------|--------|--------------|--------------|
| 1      | 20           | 10           | 18     | 3.354626e-03 | 2.034684e-03 |
| 2      | 10           | 6.065307     | 19     | 2.034684e-03 | 1.234098e-03 |
| 3      | 6.065307     | 3.678794     | 20     | 1.234098e-03 | 7.485183e-04 |
| 4      | 3.678794     | 2.231302     | 21     | 7.485183e-04 | 4.539993e-04 |
| 5      | 2.231302     | 1.353353     | 22     | 4.539993e-04 | 3.043248e-04 |
| 6      | 1.353353     | 8.208500e-01 | 23     | 3.043248e-04 | 1.486254e-04 |
| 7      | 8.208500e-01 | 4.978707e-01 | 24     | 1.486254e-04 | 9.166088e-05 |
| 8      | 4.978707e-01 | 3.019738e-01 | 25     | 9.166088e-05 | 6.790405e-05 |
| 9      | 3.019738e-01 | 1.831564e-01 | 26     | 6.790405e-05 | 4.016900e-05 |
| 10     | 1.831564e-01 | 1.110900e-01 | 27     | 4.016900e-05 | 2.260329e-05 |
| 11     | 1.110900e-01 | 6.737947e-02 | 28     | 2.260329e-05 | 1.370959e-05 |
| 12     | 6.737947e-02 | 4.086771e-02 | 29     | 1.370959e-05 | 8.315287e-06 |
| 13     | 4.086771e-02 | 2.478752e-02 | 30     | 8.315287e-06 | 4.000000e-06 |
| 14     | 2.478752e-02 | 1.503439e-02 | 31     | 4.000000e-06 | 5.400000e-07 |
| 15     | 1.503439e-02 | 9.118820e-03 | 32     | 5.400000e-07 | 1.000000e-07 |
| 16     | 9.118820e-03 | 5.530844e-03 | 33     | 1.000000e-07 | 1.000000e-11 |
| 17     | 5.530844e-03 | 3.354626e-03 |        |              |              |

## ANNEXE B : Assemblage fissile

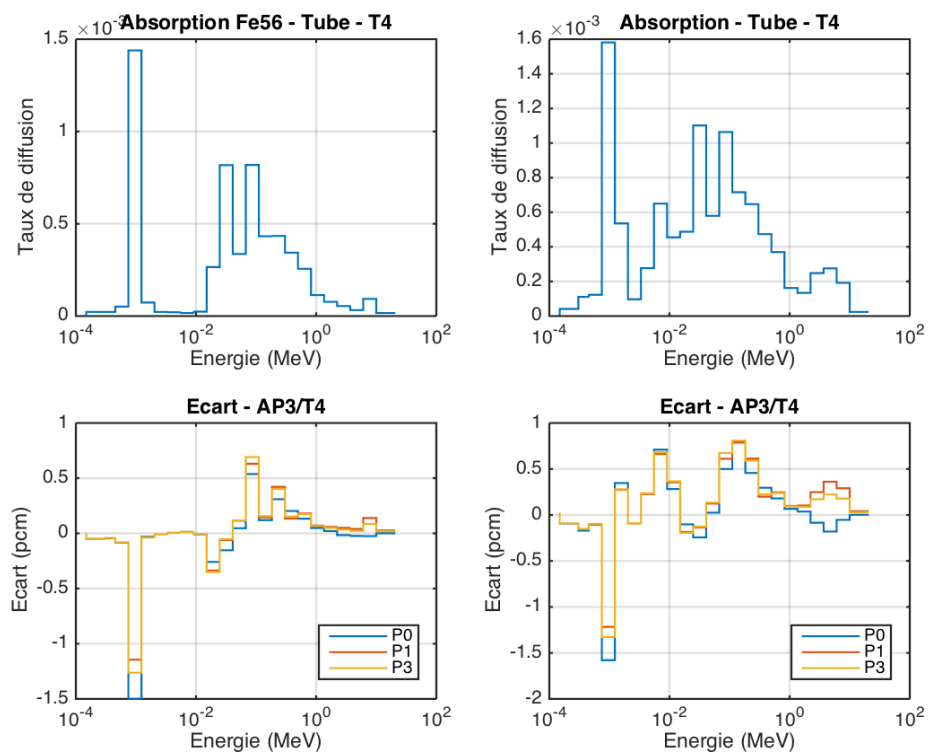


Figure B.1 Absorption du Fe56 dans le tube

## ANNEXE C : Cluster B4C

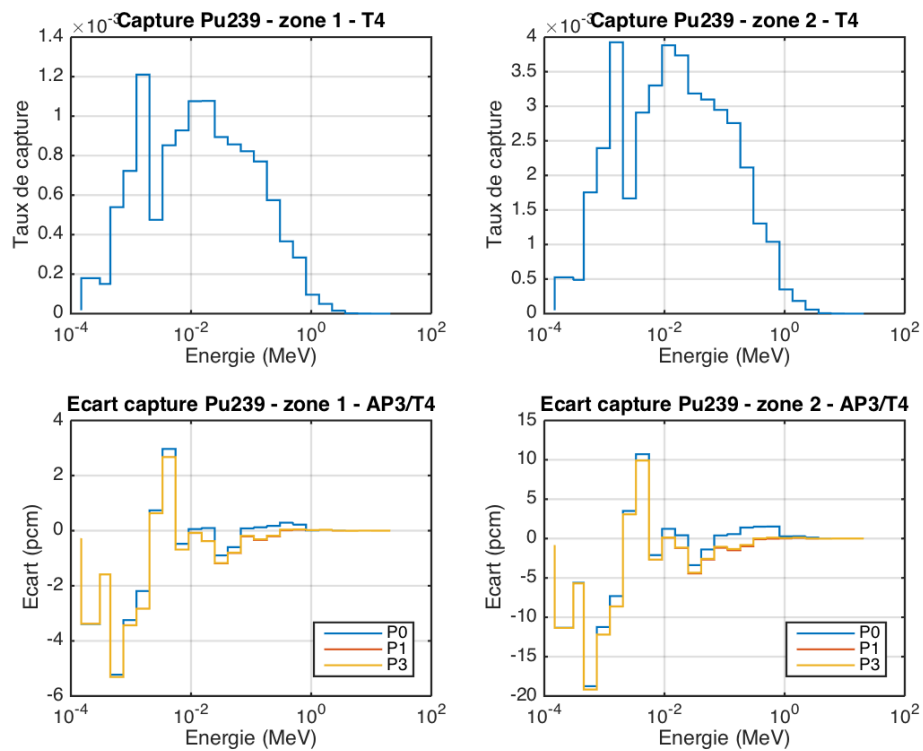


Figure C.1 Capture du Pu239 dans le cluster B4C



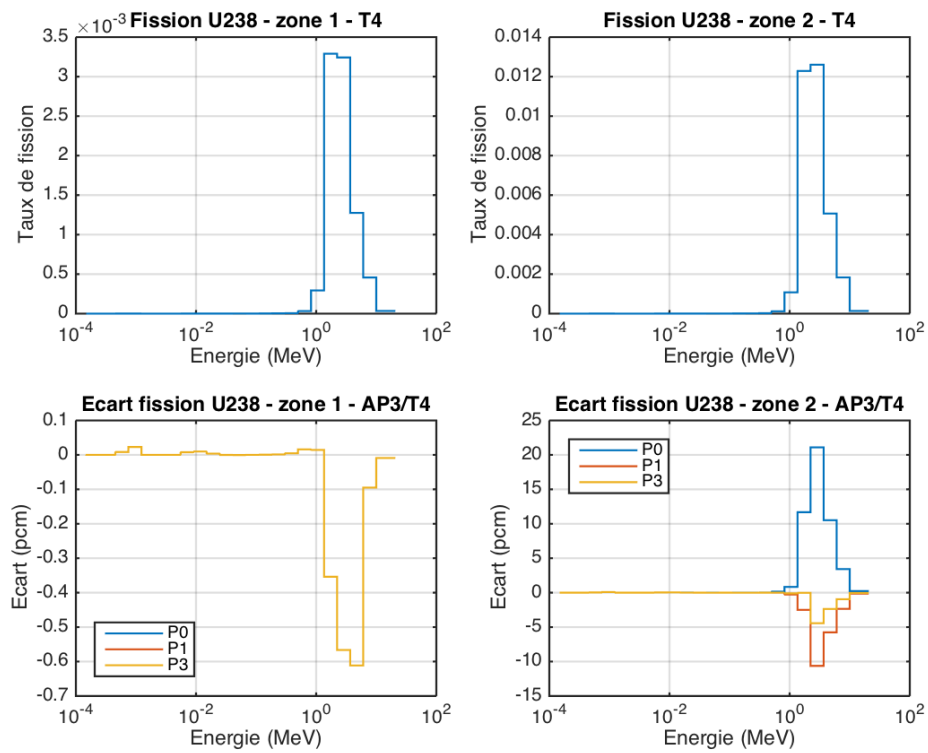


Figure C.2 Fission de l'U238 dans le cluster B4C

## ANNEXE D : Cluster fertile-fissile

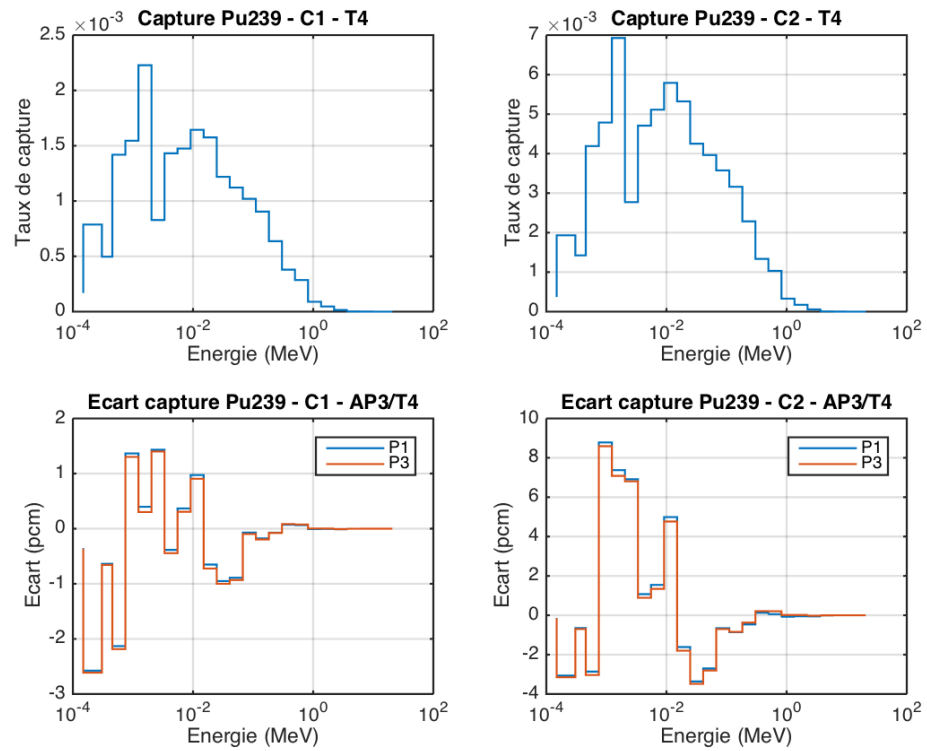


Figure D.1 Capture du Pu239 dans le cluster fertile

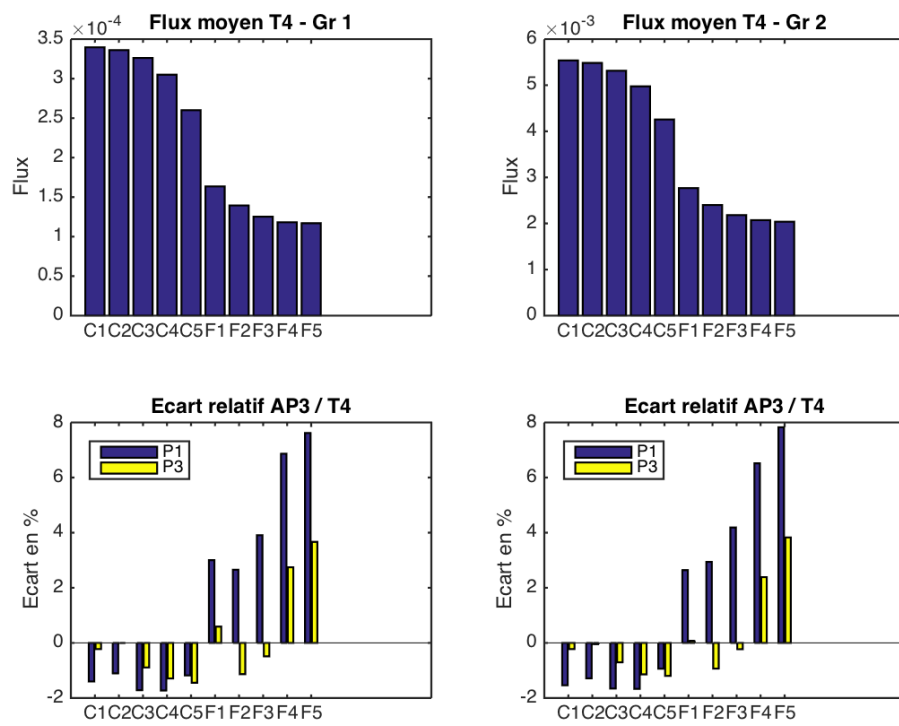


Figure D.2 Variation du flux dans la traverse - Groupes 1 et 2

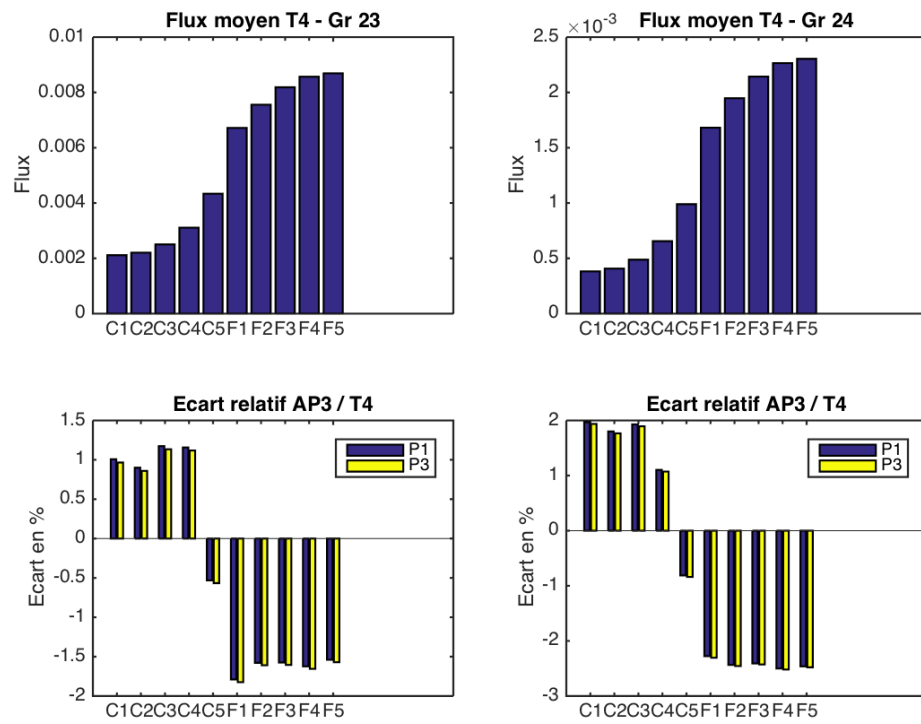


Figure D.3 Variation du flux dans la traverse - Groupes 23 et 24

# ANNEXE E : Cellule 3D fissile-fertile

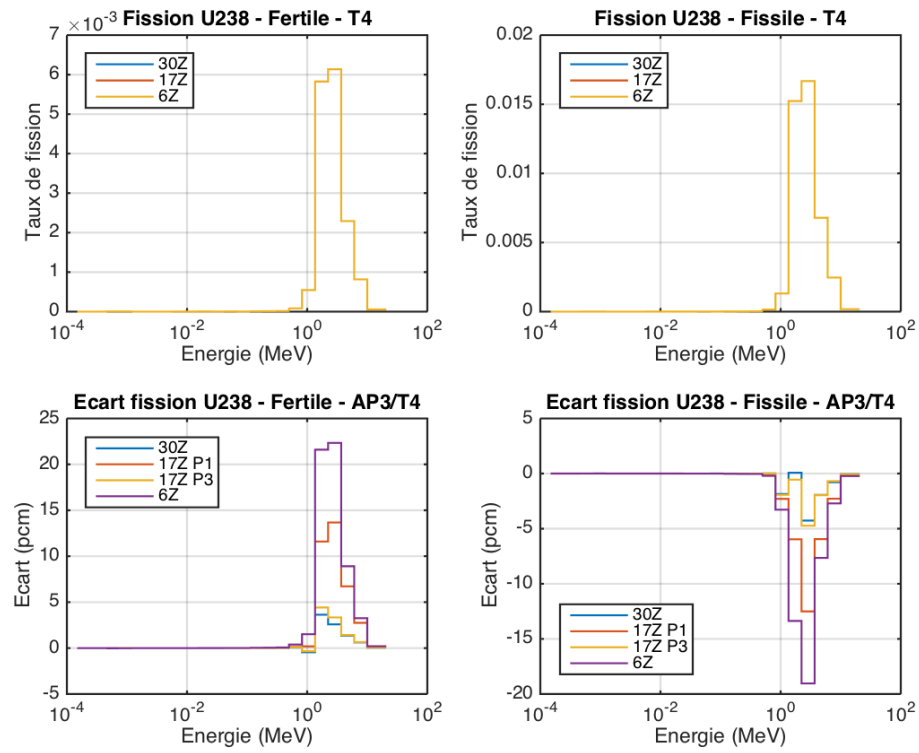


Figure E.1 Fission de l'U238 dans la cellule 3D